

## 目录

1 什么是声子	4
2 什么是Bloch电子	4
2.1 Bloch振荡能被观测到吗? . . . . .	5
3 能带宽度	5
3.1 怎么算 . . . . .	6
4 导带和价带	6
5 紧束缚近似	7
5.1 怎么计算 . . . . .	7
6 一个非常干净的材料是超导体吗	8
7 De Haas—Van Alphen 效应	8
8 朗道能级	9
8.1 朗道能级如何计算 . . . . .	10
9 格波的声学支和光学支	10
10 3-dimension	11
11 density of state	11
12 玻恩—卡门周期性边界条件	12
13 什么是声子, 并且请将声子的性质与光子用表格做比较	12
14 Du Long-Petit 定律是什么	13

目录	2
15 一定温度下, 是光学模式的声子数目多, 还是声学模式的声子数目多	13
16 同一震动模式下又是哪个模式(声or光)的声子多	13
17 同一震动模式下, 温度低的声子多还是温度高的声子多	14
18 声子数目是否守恒? 高温时, 频率为 $\omega$ 的格波声子数目与温度有何关系	14
19 晶体在绝对零度时, 还有声子(或格波)存在吗?	15
20 请简述Debye模型	15
21 请简述爱因斯坦的固体热容模型	16
22 请用能带理论解释导体与半导体与非导体	16
23 解释空穴	17
24 声子对材料的比热有什么贡献	18
25 debye温度的物理意义	18
26 分别利用爱因斯坦模型与Debye模型计算声子对比热的贡献	19
27 在半经典近似下, 写出周期性势场中运动的电子在外电场作用下的运动方程, 并以此为基础解释bloch振荡	19
28 写出磁场下电子的半经典运动方程	20
29 请用量子力学解释共价键的形成原因	20
30 紧束缚近似下, 简单立方晶体由原子 $p_x, p_y, p_z$ 态形成的能带与s态形成的能带有 什么不同	21

目录	3
31 解释霍尔效应与量子霍尔效应	22
32 描述Drude模型的物理图像	23

# Solid State phys. Final EXAM

Alphabetium and chatGPT

2023 年 2 月 22 日

## 1 什么是声子

声子是固体物理学中描述晶体振动的基本概念，也称为晶体振动子。它是一种无质量、自旋为1的能量量子 $\hbar\omega_i$

晶体中的原子或离子存在着固有的振动模式，这些振动模式会以粒子的形式体现出来，称为声子。在晶体中，声子能够传递热量和动量（准动量 $\hbar q_i$ ）声子只是反应晶体原子集体运动的激发单元，他不能脱离固体单独存在，因此声子是准粒子。

声子的能量与频率成正比，其频率范围通常在几十THz至几百THz之间。晶体中的声子具有离散的能量和频率，因此声子在固体中传播时会出现色散现象，即不同频率的声子的速度不同。一种格波即一种振动模式即一种声子。

## 2 什么是Bloch电子

Bloch电子是一种在固体中自由运动的电子，其行为受到布洛赫定理的约束。布洛赫定理是指，在一个周期性势场中，电子的波函数可以写成平面波与周期性函数的乘积形式。这个周期性函数可以表示为晶格的周期函数。

Bloch电子在晶体中的运动特性具有周期性，它们在晶格中运动时的动量取值只能

在一个Brillouin区内取值，这是因为周期性势场的存在将电子动量的取值限制在这个区间内。这种周期性可以形象地描述为电子在晶体中形成能带的结构，其中每个能带对应着不同的电子能量。

## 2.1 Bloch振荡能被观测到吗？

Bloch振荡是指在周期性势场下，电子在晶体中的振荡运动，它的频率与周期性势场的倒格矢大小成正比。Bloch振荡的周期很短，一般在飞秒量级，而且受到许多因素的影响，比如材料的宽度、载流子密度等等。

因此，观测Bloch振荡需要使用高时间分辨率的技术。最常用的技术是飞秒激光光谱学。通过使用飞秒激光脉冲激发材料，可以使电子在势场中进行快速的振荡，然后通过探测器测量材料中的光谱来观测Bloch振荡。

因此，虽然Bloch振荡很难被观测到，但现代实验技术已经可以对其进行研究。

## 3 能带宽度

能带宽度是指在固体中的能带中，电子能量的最大值与最小值之间的差异。在晶体中，电子的能量分布是在能带内的，能带宽度是固体的电学和光学性质的一个重要参数，它决定了固体中的电子输运性质和光学吸收特性。

在半导体和绝缘体中，电子的能带宽度相对较大，通常在1到10电子伏特之间。这意味着在这些材料中，电子必须获得较高的能量才能从价带跃迁到导带中，因此这些材料具有高电阻和低电导的特性。

而在金属中，电子的能带宽度很小，甚至可以看作是零，这是因为金属的导带和价带之间没有禁带。因此，电子在金属中可以自由地运动，导致金属具有良好的导电性和导热性。

能带宽度的大小取决于材料的晶体结构、化学成分和电子相互作用等因素，因此在材料科学和半导体器件设计中，能带宽度的计算和调控具有重要意义。

### 3.1 怎么算

$$\Delta E = E_{max} - E_{min}, \text{ where } E_{max} \text{ or } E_{min} \text{ all equal to } \frac{dE}{dk}$$

$$\dot{r} = v_n(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

## 4 导带和价带

导带和价带是固体中的两个基本能带，它们对材料的电学和光学性质起着重要作用。

价带是指固体中价电子的能量状态，它位于固体的最高占据能级以下。当一个价电子被激发到更高的能级时，它就离开了价带，并成为导电的自由电子。在导体中，由于价带与导带之间的能量差很小，这些电子可以很容易地被激发到导带中，因此导体具有良好的导电性。

导带是指固体中自由电子的能量状态，它位于价带之上，相对于价带，导带的能量更高。在绝缘体中，导带与价带之间存在一个很大的能隙，使得电子不能从价带跃迁到导带中，因此绝缘体具有高电阻和低电导的特性。在半导体中，导带与价带之间的能隙相对较小，因此电子可以通过一定的激发获得足够的能量跃迁到导带中，从而产生较高的电导率。在半导体器件中，通常会利用控制导带和价带之间的电荷状态来实现器件的功能，如二极管、晶体管等。

导带和价带的能量位置和能隙大小取决于材料的化学成分、晶体结构和电子相互作用等因素，因此它们是固体中的重要参数。对于材料科学和半导体器件设计而言，了解和控制导带和价带的性质非常重要。

## 5 紧束缚近似

一维紧束缚近似（Tight Binding Approximation）是一种处理晶体中电子运动的方法。在该方法中，假设每个原子仅与最近邻的原子有相互作用，且电子只在这些相邻原子之间运动，而忽略其他原子对电子的影响。

具体而言，该方法中假设固体中的每个原子都有一个原子轨道，电子只能占据这些原子轨道，并且只有最近邻的原子轨道之间存在交叉。在这种情况下，电子在晶格中移动时可以被描述为在不同的原子轨道之间跃迁。这些跃迁会导致电子在晶格中形成能带结构，即一系列能量区域，其中电子可以占据。

### 5.1 怎么计算

紧束缚近似是一种处理周期性结构材料中的电子行为的方法。其基本思想是将晶格中每个原子的价电子看作一个局域的量子态，然后通过量子力学的方法，将相邻的原子之间的电子相互作用考虑在内，得到整个材料中的电子行为。

在紧束缚近似中，晶体的哈密顿量可以表示为：

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} t_{i,j} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \sum_i V_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$$

其中， $\hat{c}_i^\dagger$ 和 $\hat{c}_j$ 是电子的产生和湮灭算符， $t_{i,j}$ 是第*i*个原子和第*j*个原子之间的跃迁能， $V_i$ 是第*i*个原子的电子势能。此外，由于晶体的周期性，我们可以采用布洛赫函数的形式来描述电子波函数：

$$\psi_k(r) = u_k(r) e^{ik \cdot r}$$

其中， $u_k(r)$ 是满足周期性边界条件的周期函数， $k$ 是晶格的倒格矢。将布洛赫函数代入哈密顿量中，我们可以得到布洛赫哈密顿量：

$$\hat{H}k = \sum_i V_i \hat{c}_{i,k}^\dagger \hat{c}_{i,k} - \sum_{i,j} t_{i,j} \hat{c}_{i,k}^\dagger \hat{c}_{j,k} e^{i(k_i - k_j) \cdot r_{i,j}}$$

其中， $\hat{c}_{i,k}^\dagger$ 和 $\hat{c}_{j,k}$ 是对应于倒格矢*k*的产生和湮灭算符， $r_{i,j}$ 是第*i*个原子和第*j*个原子之间的距离向量。

在紧束缚近似中，我们通常采用平面波展开方法来计算 $t_{i,j}$ 和 $V_i$ ，得到哈密顿量后可以通过数值计算或者解析计算的方式得到能带结构、能带宽度等物理量，从而理解材料的导电性、光学性质等。

## 6 一个非常干净的材料是超导体吗

不一定。虽然超导体通常会表现出较高的电阻率和电导率，但这并不意味着材料非常干净。超导体通常是指具有零电阻和完全反射磁场的材料，这些特性是由于它们电子的配对和库珀对的形成而产生的。在实际应用中，超导体需要表现出很强的超导性能，这通常需要较高纯度和较少杂质的材料。因此，通常情况下，超导体需要是较为干净的材料。但是，非常干净的材料不一定表现出超导行为。

## 7 De Haas—Van Alphen 效应

De Haas-Van Alphen效应是指在强磁场下，金属中的费米面在磁场的影响下发生变化，导致磁性的体积效应。这种效应是由荷兰物理学家De Haas和Van Alphen在1930年首次观测到的，因此得名。

当磁场施加在金属上时，电子受到洛伦兹力的影响，导致电子的运动受到限制。在强磁场下，费米面在磁场方向上会发生周期性变化，这会导致金属的物理性质（如磁化率、电阻率等）也会周期性变化。这种周期性变化的特征频率由金属的晶格结构和费米面的形状决定。

De Haas-Van Alphen效应中的周期就可以了解费米面的形状。

通过测量磁场下金属的物理性质的周期性变化，可以确定金属中的费米面形状，从而研究金属的电子结构。

同时，由于不同金属的费米面形状和大小不同，因此De Haas-Van Alphen效应也可



以用于鉴定金属的种类和纯度。

磁化率 $\chi$ 随磁场倒数 $\frac{1}{B}$ 做周期性振荡

De Haas-Van Alphen效应可以用量子力学中的准经典理论解释。

在磁场中，电子的运动会受到磁场的影响。在磁场较弱的情况下，可以使用准经典的Drude模型描述电子的运动。Drude模型假设电子在晶格中自由运动，且受到一个周期性的势场的作用。该周期性势场可以看做是由原子核和周围电子的平均电荷分布所形成的。

在外加磁场的作用下，Drude模型需要修正，将经典的电子运动方程改为量子力学中的薛定谔方程。由于磁场的存在，电子的能量在k空间中发生了变化，也就是说，能量本征值不再只由平移动量决定，而需要加上磁场的影响。在周期性势场的作用下，电子的运动可以通过Bloch函数描述，Bloch函数可以看作是k空间中的晶格函数。

当磁场作用下，Bloch波函数的能量本征值发生了变化，而能带的形状和宽度不变。在低温下，当磁场从0增加时，电子占据的k空间体积会不断变化，这导致电子的能量本征值的变化，从而使得磁化率随磁场的变化呈现出周期性变化，这就是De Haas-Van Alphen效应。

总之，De Haas-Van Alphen效应可以通过将Drude模型中的经典电子运动方程修正为量子力学中的薛定谔方程，然后将能带和Bloch函数的概念引入，进而描述出电子在外磁场作用下的运动行为

## 8 朗道能级

朗道能级是在磁场下发生量子限制的粒子的能量级别。它最初由苏联物理学家朗道在1940年提出，并用于解释磁性材料的特性。

在磁场下，带电粒子会受到洛伦兹力的影响，其运动将在磁场方向上发生循环。朗道能级是指在磁场下，电子能量和磁量子数之间的关系。磁量子数是量子力学中描述磁

场中粒子运动状态的参数，它决定了电子轨道的形状和大小。在磁场下，电子能量在朗道能级中取离散值，而非在自由状态下连续取值。

朗道能级的计算涉及到电子的波函数和磁场的影响。在磁场下，电子波函数将发生改变，其在晶格中的周期性也将受到影响。因此，朗道能级的计算需要用到量子力学和固体物理学中的知识。

朗道能级在研究磁性材料、磁场下的电子输运、二维电子气等方面具有重要的应用。例如，在研究磁性材料的特性时，朗道能级可以用于描述磁性材料中电子的自旋和轨道运动。在研究二维电子气时，朗道能级可以用于描述电子在二维平面内的运动。

## 8.1 朗道能级如何计算

朗道能级是描述带电粒子在磁场中运动时能级的一种表示方法，其计算可以通过以下公式得到：

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

其中， $\hbar$ 为约化普朗克常数， $\omega_c$ 为回转频率， $n$ 为整数。

在磁场中，带电粒子的运动轨迹会发生曲线偏转，形成圆形轨道，其运动频率 $\omega_c$ 可以表示为：

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

其中， $e$ 为电子电荷， $B$ 为磁感应强度， $m$ 为带电粒子的质量。

因此，朗道能级可以通过带电粒子在磁场中的回转频率计算得到。不同的 $n$ 对应不同的能级，且能级之间的能量差为 $\hbar\omega_c$ ，其中 $\hbar$ 为约化普朗克常数。

## 9 格波的声学支和光学支

固体中的晶格振动可以分解成两类：声学振动 $\omega_-$ 和光学振动 $\omega_+$ 。声学振动是指晶格中原子在同一平面内、同向振动的振动模式，其频率与波矢的乘积成正比。光学振动

是指晶格中原子在不同平面内、不同方向振动的振动模式，其频率与波矢的乘积成反比。

对于一个具有周期性结构的固体，其晶格振动可以用布拉维格子和声学支、光学支相结合的方法来描述。布拉维格子是描述固体晶体结构的基本概念，它包含了所有晶体的独特结构信息。声学支是布拉维格子中的一类晶格振动模式，其对应的振动频率与波矢的乘积呈现线性关系，声学支模式可以分为纵波和横波两种。光学支是布拉维格子中的另一类晶格振动模式，其对应的振动频率与波矢的乘积呈现反比关系。光学支模式通常在布拉维格子中存在禁带，因此只有在特定的波矢范围内才能出现。

$\omega_-$ ：长波极限下，两种原子的运动完全一致，格波类似声波，称为声学支。

$\omega_+$ ：相邻原子的相对运动，振动方向相反，长波极限下质心不动。因为是相对振动，所以如果原胞内是2个带电相反的离子，则会产生电偶极矩（可与电场相互作用），在某种光波作用下可以激发此类晶格振动，称为光学支

## 10 3-dimension

N个原胞且每个原胞有3n个原子的3D晶体格波（也是自由度）有3n支，其中

$$\begin{bmatrix} 3 \\ 3n-3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} wavevector \\ mode \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N \\ 3nN \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} acoustic \\ optic \end{bmatrix} =$$

## 11 density of state

$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dq}{d\omega}$ , where q is wave vector

## 12 玻恩-卡门周期性边界条件

玻恩-卡门（Born-Karman）周期性边界条件是一种用于描述晶体周期性的边界条件。它指出，一个晶体的性质在任意两个相邻的晶胞之间是相同的。这意味着，晶体的电子波函数或者晶格振动的本征态在相邻的两个晶胞之间具有相同的值。

使用玻恩-卡门周期性边界条件，我们可以把一个具有无限多个晶胞的晶体看作一个周期性的体系。在这个体系中，晶体的性质会以周期性的方式重复出现。这对于描述一些晶体的性质非常有用，比如电子结构、光学性质、声学性质等等。

在数学上，玻恩-卡门周期性边界条件通常被表示为： $\phi(x+a) = \phi(x)$  其中， $\phi(x)$ 表示电子波函数或者晶格振动的本征态， $a$ 是晶胞的尺寸。这个条件意味着，在任意两个相邻的晶胞之间，波函数具有相同的值。这个条件对于数值模拟等方面非常重要，因为它能够简化模拟的计算量，同时也使得模拟的结果更加准确。

## 13 什么是声子，并且请将声子的性质与光子用表格做比较

性质	声子	光子
种类	准粒子	粒子
质量	有质量	无质量
电荷	无电荷	有电荷
作用	介质中的振动	电磁波
能量	能量量子为声子	能量量子为光子
速度	声速	光速
存在形式	存在于固体中	存在于真空中
相互作用	声子之间相互作用	光子之间不相互作用
交换	声子在固体中的传递	光子在真空中的传递

## 14 Du Long-Petit 定律是什么

Du Long-Petit 定律 (Dulong-Petit Law) 是指在一定条件下, 所有稳定晶体在绝对零度下的摩尔热容都是常量, 且等于  $3R$ , 其中  $R$  是气体常数。简单来说, Du Long-Petit 定律表明所有晶体在绝对零度下具有相同的热容, 而且热容的大小与晶体的化学成分无关。

## 15 一定温度下, 是光学模式的声子数目多, 还是声学模式的声子数目多

在一定温度下, 光学模式的声子数目通常比声学模式的声子数目少。这是因为光学模式的声子具有较高的频率和能量, 其配分函数比声学模式的声子更接近于 Boltzmann 分布的高能态部分。因此, 光学模式的声子在一定温度下更难以被激发, 其数目相对较少。与之相反, 声学模式的声子具有较低的频率和能量, 其配分函数更接近于 Boltzmann 分布的低能态部分, 因此在一定温度下其数目相对较多。

## 16 同一震动模式下又是哪个模式 (声or光) 的声子多

对于同一震动模式, 通常来说光学模式的声子数目仍然比声学模式的声子数目少。这是因为光学模式的声子具有更高的频率和能量, 相比于声学模式更难被激发, 因此光学模式的声子数目相对较少。然而, 在特定的温度和材料条件下, 可能会发生特殊情况, 例如在某些材料中可能会存在反常的声子分布, 这时候同一震动模式下哪个模式的声子多并不是一定的, 需要具体分析。

## 17 同一震动模式下，温度低的声子多还是温度高的声子多

在同一震动模式下，温度低的声子数目通常比温度高的声子数目少。这是因为声子在晶格中的振动是由于热激发而产生的，其分布受到Boltzmann分布定律的影响。根据Boltzmann分布定律，随着温度的升高，更多的能量可用于激发声子，因此温度越高，相应的声子数目就越多。与之相反，当温度较低时，声子被激发的能量较小，导致声子数目较少。但是，在低温下，量子力学效应会影响声子的行为，使其表现出反常的行为，这时候具体情况需要具体分析。

## 18 声子数目是否守恒？高温时，频率为 $\omega$ 的格波声子数目与温度有何关系

在晶体中，声子数目是守恒的，因为声子是一种准粒子，其数目与能量分布密切相关。在热力学平衡状态下，声子的能量分布服从玻尔兹曼分布定律，因此在同一温度下，相同频率的声子数目是一定的。

高温下，声子的分布受到Boltzmann分布定律的影响，声子数目随着温度的升高而增加。对于频率为 $\omega$ 的格波声子，其分布服从玻尔兹曼分布，其数目可以用以下公式计算：

$$n_{\omega} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

其中， $n_{\omega}$ 是频率为 $\omega$ 的声子数目， $\hbar$ 是普朗克常数除以 $2\pi$ ， $k_B$ 是玻尔兹曼常数， $T$ 是温度。

从公式可以看出，当温度越高时，声子数目越多。当温度无穷大时，声子数目无限大，因为此时所有能级都被激发。而当温度趋近于零时，声子数目趋近于零，因为此时所有能级都处于基态。

## 19 晶体在绝对零度时，还有声子（或格波）存在吗？

在绝对零度时，晶体不会有任何热运动，因此没有声子的存在。根据经典统计物理学的预测，绝对零度下晶体的所有原子都处于它们的基态，没有任何激发状态，因此没有声子模式的存在。然而，在量子力学中，由于零点能的存在，某些声子模式仍然存在。零点能是指在温度为零时，粒子仍然拥有的一些能量。这意味着在绝对零度时，一些声子模式仍然存在，并且具有零点能。因此，根据量子力学的观点，即使在绝对零度下，晶体中仍然存在声子。

## 20 请简述Debye模型

Debye模型是用于描述固体中声子的传播和热学性质的一种经典理论模型。该模型假设固体中的声子是在一个均匀的三维介质中传播的，并且声子与晶格中原子的相互作用可以视为弹性散射。Debye模型的基本思想是将固体中的声子视为类似于光子的粒子，其具有确定的能量和动量，但由于声子具有波动性，因此它们也可以用波函数来描述。

Debye模型假设固体中存在一种声子密度分布函数，称为Debye分布，该分布描述了不同频率下的声子数目。Debye模型假设声子能量和波矢之间存在一种简单的线性关系，即声子能量与波矢的模值之间的关系是一个线性函数。根据这个假设，Debye分布可以用一个特定的数学函数来描述。

通过对Debye分布进行积分，可以得到固体的总热容和热导率等热学性质。Debye模型在研究低温下的固体热学性质方面具有很大的成功，但是在高温和高频率范围内，Debye模型会失效。这是因为固体中的声子在高频率和高温下表现出不同的行为，需要使用更复杂的理论模型来描述。

## 21 请简述爱因斯坦的固体热容模型

爱因斯坦的固体热容模型是一种基于固体分子振动的理论模型，用于解释固体的热容性质。该模型假设固体中的原子或离子是点粒子，而固体分子振动模式是量子化的谐振子。该模型与德拜模型类似，但与德拜模型不同的是，它将固体中所有振动模式的能量均视为相等的。

爱因斯坦的固体热容模型假设固体中的所有原子都是用相同的频率  $\omega$  振动的谐振子。这个频率被称为爱因斯坦频率。该模型认为固体的热容主要由固体分子的振动贡献，而与固体中电子的行为无关。通过对谐振子的能量进行统计，可以得到固体的热容与温度的关系，即爱因斯坦热容公式：

$$C_V = 3Nk_B \left( \frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}$$

其中， $C_V$ 是固体的热容， $N$ 是固体中的原子数， $k_B$ 是玻尔兹曼常数， $\hbar$ 是约化普朗克常数， $T$ 是温度， $\omega_E$ 是爱因斯坦频率。

爱因斯坦的固体热容模型具有很高的理论简洁性，但在一些情况下并不是很准确，例如对于非晶态固体或低维材料等。

## 22 请用能带理论解释导体与半导体与非导体

在能带理论中，导体、半导体、非导体和超导体可以通过电子的能带结构来解释：

**导体：**导体中的价带与导带之间有部分重叠，这意味着能够存在自由电子，电子可以在导带和价带之间自由移动，导致导电性能。在导体中，电子占据的态密度非常高，因此在温度接近绝对零度时，仍然有电子存在。

**半导体：**半导体的价带与导带之间存在一定的禁带宽度，禁带宽度决定了半导体的导电性能。在纯净的半导体中，电子处于价带中，而导带是空的。只有在外部施加足够的能量（例如热激发或光激发）时，电子才能跃迁到导带中，形成电子空穴对，从而导致电



导率增加。掺杂可以改变半导体的电子浓度，进一步改变其导电性能。

**非导体：**非导体的禁带宽度非常大，远大于可用的热能或光能。在非导体中，电子处于价带中，而导带是空的。因此，非导体不会导电。

**超导体：**超导体是指在低温下具有无电阻电导的材料。超导体的特殊之处在于，它们存在于它们的费米面附近的能态，形成所谓的“超导电子对”。

**绝缘体：**价带和导带之间的能隙非常大，以至于没有电子可以通过热激发或外部激励进入导带，从而形成一个非常高的电阻率。根据能带理论，这是因为绝缘体的导带是空的，价带是满的。因此，即使存在电场，也没有自由电子可以在导带中移动，因此没有电流流动。这种情况在基态下是稳定的，因为电子在价带中具有最低的能量。这些电子对之间存在一种称为库伯对的相互作用，导致电阻为零。超导体的超导性质可以通过能带理论来解释，其中超导态被认为是由于电子和声子之间的相互作用所产生的

## 23 解释空穴

在晶体中，电子可以在价带和导带之间跃迁，这是晶体导电的基本机制。而当一个电子从价带跃迁到导带时，留下一个电子空穴。因此，空穴可以被看作是一个相对于固体晶体中正常运动的电子而言，具有正电荷和反向运动的电荷载流子。

空穴是电子带中缺少电子的部分。在半导体或绝缘体中，价带通常被填满，而导带则很少填满。因此，空穴在半导体或绝缘体中是常见的。在导体中，由于有自由电子，空穴的存在不如在半导体或绝缘体中明显。在超导体中，空穴的概念与普通材料中略有不同。在超导体中，空穴是指超导体中缺少电子的区域，也可以看作是载流子的缺陷。当超导体被冷却到超导转变温度以下时，电子在超导带中形成了库珀对，这种状态下不存在自由电子和空穴。因此，超导体可以通过完全消除电阻来传导电流。

## 24 声子对材料的比热有什么贡献

声子对材料的比热有重要贡献。材料的比热可以通过声子的热容来计算，即每个模式的声子对材料的热容有贡献，其贡献可以表示为： $C_{ph} = \sum_{\lambda} C_{v,\lambda}$

其中， $C_{ph}$ 是声子热容， $\lambda$ 是声子模式， $C_{v,\lambda}$ 是每个声子模式的贡献。

声子热容的计算需要考虑每个声子模式的频率和能量，因为这些参数会影响每个模式中激发的声子数目。因此，声子热容与温度相关，并且在低温下，声子热容呈现出 $T^3$ 的依赖关系，而在高温下则呈现出线性的关系。

总的来说，声子对材料的比热有着重要的贡献，因为它们是材料中储存和传递热能的主要机制之一。

## 25 Debye温度的物理意义

Debye温度是一个材料的热力学性质，代表了材料中晶格振动的频率和密度的平均值。具体来说，Debye温度是材料中声子频率的平均值，也可以看作是一个材料中声子所占据的状态数的极限值。

在低温下，材料的比热主要由声子贡献，而Debye温度则是比较材料中不同频率声子的重要参数。当温度低于Debye温度时，只有低频声子会参与热运动，因此材料的比热会随着温度的降低而逐渐减小。当温度高于Debye温度时，所有声子都会参与热运动，材料的比热则近似常数。

另外，Debye温度也与材料的其他性质密切相关，例如导电性、热导率、弹性模量等。因此，Debye温度被广泛应用于材料科学研究和工业应用中。

## 26 分别利用爱因斯坦模型与Debye模型计算声子对比热的贡献

声子对比热的贡献可以通过爱因斯坦模型和Debye模型进行计算。

首先，根据爱因斯坦模型，材料中的所有声子具有相同的频率 $\omega_E$ ，该频率称为爱因斯坦频率。对于低温下的比热，爱因斯坦模型给出：

$$C_V = 3Nk_B \left( \frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}$$

其中， $N$ 是晶体中的原子数， $k_B$ 是玻尔兹曼常数， $T$ 是温度。可以看出，爱因斯坦模型中声子的贡献是在低温下逐渐逼近常数 $3Nk_B$ ，当温度足够高时，声子对比热的贡献将迅速下降。

其次，根据Debye模型，材料中的声子是连续的频率分布，其密度随频率的平方增加，直到达到Debye频率 $\omega_D$ 为止。在低温下，声子的频率趋向于0，声子的贡献可以表示为：

$$C_V = 9Nk_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

其中， $\theta_D$ 是Debye温度。Debye模型可以在所有温度下计算比热，但需要知道Debye温度。当温度趋向于无穷大时，声子对比热的贡献将趋向于常数 $3Nk_B$ 。

因此，可以看出在低温下，Debye模型和爱因斯坦模型给出的声子对比热贡献都近似于常数 $3Nk_B$ 。在高温下，Debye模型更为准确。

## 27 在半经典近似下，写出周期性势场中运动的电子在外电场作用下的运动方程，并以此为基础解释bloch振荡

在半经典近似下，可以将运动的电子视为经典粒子，其运动方程可以描述为：

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -eE(r) - \frac{\partial U(r)}{\partial r}$$

其中,  $m$ 是电子的质量,  $r$ 是电子的位置矢量,  $e$ 是电子的电荷,  $E(r)$ 是外加的电场,  $U(r)$ 是周期性势场。

假设周期性势场为:

$$U(r) = \sum_n U_n \cos(G_n \cdot r)$$

其中,  $U_n$ 是势场的振幅,  $G_n$ 是倒格子矢量。

将这个势场代入电子的运动方程中, 可以得到:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -eE(r) - \sum_n U_n \frac{\partial \cos(G_n \cdot r)}{\partial r}$$

化简后得到:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -eE(r) + \sum_n U_n G_n \sin(G_n \cdot r)$$

这个方程描述了运动的电子在外电场作用下在周期性势场中的运动情况。

在周期性势场中, 电子的能量是分散的, 因此电子具有能带结构。当电子在电场作用下发生振荡运动时, 它会在不同的能带之间跃迁, 从而产生所谓的Bloch振荡。这种振荡只在极低的温度下才能观察到, 因为在较高的温度下电子会失去相干性, 导致Bloch振荡的衰减。

## 28 写出磁场下电子的半经典运动方程

在磁场下, 电子受到洛伦兹力的作用, 其半经典运动方程可以写为:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

其中,  $m$ 是电子的质量,  $\vec{r}$ 是电子的位置矢量,  $e$ 是电子的电荷量,  $\vec{E}$ 是电场强度,  $\vec{B}$ 是磁场强度,  $\vec{v}$ 是电子的速度矢量。

## 29 请用量子力学解释共价键的形成原因

共价键是由两个原子中的价电子对相互作用形成的, 其形成原因可以通过量子力

学的角度来解释。在量子力学中，电子的运动状态由波函数描述。当两个原子相互靠近时，它们的波函数发生重叠，形成一个双原子分子的波函数。

在这个过程中，价电子的波函数发生变化，它们不再是各自原子的波函数，而是变成了双原子分子的波函数。在这个波函数中，价电子的位置不再是固定的，而是分布在两个原子之间。这种电子的位置分布和原子间距有关，被称为共价键的轨道。

共价键的形成需要满足能量最低原理，即分子中所有电子的总能量最低。电子在共价键中的能量较低，而且共价键的形成能量通常低于原子之间的静电斥力。因此，当两个原子靠近时，它们中的电子会形成共价键，以减少总能量。

总之，共价键的形成是由价电子之间的相互作用引起的，这种相互作用在量子力学中可以通过波函数来描述。在共价键中，电子的位置不再是固定的，而是分布在两个原子之间，形成了共价键的轨道。共价键的形成需要满足能量最低原理，使分子的总能量最低。

### 30 紧束缚近似下，简单立方晶体由原子 $p_x, p_y, p_z$ 态形成的

#### 能带与s态形成的能带有什么不同

紧束缚近似下，对于简单立方晶体中由原子  $p_x, p_y, p_z$  形成的能带和由 s 态形成的能带，它们之间的主要区别在于：

s 态的电子是以球对称的方式分布在晶体原子周围的，而 p 态的电子则是在空间上存在方向性（偏振性）的，即它们有确定的轨道方向，因此 s 态能带是各向同性的，而 p 态能带则具有一定的各向异性。由于晶格周期性，晶体的波函数具有周期性，对于 s 态能带中的电子来说，其波函数的周期等于晶格常数，即电子能量与晶格周期具有相同的周期性；而对于 p 态能带中的电子，其波函数的周期等于晶格常数的一半，即电子能量与晶格周期具有二倍的周期性。因此，由 s 态形成的能带具有各向同性且能量周期

性与晶格周期相同，而由  $p$  态形成的能带则具有各向异性且能量周期性与晶格周期的二倍相同。

### 31 解释霍尔效应与量子霍尔效应

霍尔效应是指在垂直于电流流向的磁场作用下，导体中会出现横向的电势差和电流，这个效应被发现后被称为霍尔效应。霍尔效应可以用经典电动力学的理论解释，即洛伦兹力的作用。但是当材料厚度减小到几个微米的量级，并且磁场足够强时，就会出现新的效应，被称为量子霍尔效应。量子霍尔效应是由于量子力学的效应导致的，电子在磁场中发生布洛赫振荡，形成了离散的能级，导致电子行为具有局域化的性质，因此在材料表面形成能带空隙，表面电子的行为被限制在这个空隙内，导致电导为零，只有通过边界上的一些特殊的状态才能导电。量子霍尔效应可以用以下简单的模型进行解释：考虑一个二维的电子气体，位于磁场 $\mathbf{B}$ 中，并假设在材料边界附近存在一个平缓的电势。在磁场中，电子会发生布洛赫振荡，其波函数为平面波和一个随着位置变化的振荡因子的乘积。如果外部电势足够平缓，则可以将这个乘积看作是一个沿着边界方向变化的函数和一个垂直于边界方向变化的函数的乘积。这两个函数可以分别表示为右移和左移的波函数。在这种情况下，只有位于材料边界的电子才能在能级上留下不为零的密度，而在材料的内部，电子由于能级之间存在能带空隙而不能在能级上留下密度。因此，只有沿着材料边界的电子才能贡献到导电。强磁场下，这个能级结构会出现分立的能带，每个能带上都有一定数量的局域化电子。这些电子可以被分配到不同的能级上，从而在材料表面形成空隙，导致量子霍尔效应的出现。

## 32 描述Drude模型的物理图像

Drude模型是一种经典模型，用于描述金属中的电子导电行为。该模型基于以下假设：

- 1.金属中的电子被视为自由电子，其行为类似于一个气体分子。
- 2.金属中存在强烈的离子实与电子的相互作用。
- 3.电子在金属中受到来自离子实的随机碰撞，这些碰撞导致电子的速度发生变化。

基于以上假设，Drude模型可以通过牛顿力学与经典电动力学的基本定理来描述电子的运动行为。该模型中，电子在外加电场的作用下受到加速度，但在受到离子实碰撞时，速度会发生随机改变。这些随机碰撞可以看作是电子受到了阻力，导致电子运动速度的平均值下降。

因此，Drude模型可以将金属中电子的电导率表示为：

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

其中 $n$ 是电子数密度， $e$ 是元电荷， $\tau$ 是电子的平均自由时间， $m$ 是电子的质量。

在Drude模型中，电子的平均自由时间 $\tau$ 与电子在离子实之间的平均距离有关，即电子在金属中的平均自由程。这个时间是一个宏观物理量，反映了电子在外界作用下的运动情况。

Drude模型的物理图像是，金属中的电子在外加电场的作用下运动，受到离子实碰撞导致速度发生随机变化。这个模型比较简单，可以解释一些金属的导电性质，但也存在一些局限性，例如无法解释金属的热导率，以及对于半导体等非金属材料的适用性有限。