

固体.

名词解释.

1. 堆积比: 被硬球按格点填充晶胞所占据有效体积的最大比率。
2. 化学势: 从热平衡的热力学体系中取走一个粒子所需的能量。
3. 空晶格: 理论中周期性势场恒为0的晶格。
4. 晶列: Bravais 格子的格点可以看作分布在一系列相互平行等距的直线上, 每一直线族称为晶列。
晶向: 在一个晶列中从任一格点沿晶列方向到最近邻格点的平移矢量。
平面族, 晶面。
5. 自由电子近似: 忽略电子和离子实之间的相互作用。
独立电子近似: 忽略电子和电子之间的相互作用。
6. Bragg 反射定律: 入射波在周期结构中发生衍射极大时波长、入射角和面间距的关系: $2d \sin \theta = n\lambda$ 。
von-Laue 方程: $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}_h$
7. 原胞: 晶体中具有平移对称性的基本结构单元。
8. 晶胞: 保持晶体宏观对称性的基本结构单元。
9. 晶格: 格点的总和。
格点: 晶体中代表基元位置的几何点。 格子: 由格点排列形成的空间点阵。
10. 声子: ~~描写~~晶格振动的能量量子。
格波: 描写晶体中原子集体振动的波。
11. 费米能级: $T=0$ 时为电子占据的最高能级; 其他温度下是电子占据概率为 $\frac{1}{2}$ 的能级。

固体物理·简答题整理

1. 倒格子是否仍保持其正格子的宏观对称性?

是。

2. (1) 给定的正格子是否只有唯一的倒格子与之对应?

是。因为倒格子的定义基于正格子的几何结构。

(2) 给定的正格子基矢是否只有唯一的倒格子基矢与之对应?

是。由公式唯一确定。

(3) 给定的正格矢 \vec{R} 是否只有唯一的倒格矢 \vec{k} 与之对应?

否。 $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$ ，并不是 1:1 对应的。

3. 以密勒指数表示的晶面族 (hkl) ，其中 hkl 是否是该晶面族中最靠近原点的晶面在各轴上截距的倒数? 晶面指数 $(h_1 h_2 h_3)$ 呢?

→ 以原胞基矢为单位。

密勒指数不一定，而 $(h_1 h_2 h_3)$ 一定是最近面。

→ 反例：面心立方格子

4. 对于同一晶体，原胞的形状唯一吗? 晶胞呢?

原胞形状不唯一，因为基矢的选择不同，其形状也不同。

晶胞形状唯一，因为是描述宏观对称性的基本结构单元。

5. 布里渊区边界上的简并是否一定被打开?

取决于傅里叶系数 $|v_n|$ 是否为零。

简并打开是否一定形成禁带?

不一定。一维情况下一定，高维不一定，因为有能带交叠。

布里渊区边界能级简并打开的物理原因是什么?

真实晶体比空晶格多了势能项，其傅里叶展开系数 $|v_n| \neq 0$ ，产生能隙 $E_g = 2|v_n|$ 。

6. 为什么温度越高，费米能级反而越低，其物理意义是什么?

温度越高，费米能级以下的电子会跃迁到费米能级以上，费米能级会下降。

物理意义：温度越高，粒子本身能量就很大，取出一个粒子所需要的附加能量变小。

7. 对热传导和电导有贡献的电子都是费米能级附近的电子, 它们有差别吗?
有。温度场无方向性, 电场有方向性。电场的方向性导致了费米球的偏移, 使二者有本质区别。

8. 衍射理论依赖于晶格的^{平衡}周期性, 但衍射理论的假设之一是原子刚性固定。如果温度升高, 原子作热振动, 即使是微小振动, 也偏离了平衡位置, 问: 这时, 衍射极大条件还满足吗? 仍满足。

偏离平衡位置的是原子核, 而X射线主要受电子散射。与快速运动的电子相比, 对原子核微小的无规则偏移作热平均后即可得这个结论。散射是受电子散射, 虽然原子核在运动, 但其平衡位置仍保持周期性结构。

9. 放弃自由电子近似会导致多体问题吗?

不会。因为离子实可以看成是一个周期性势场。

10. 频谱关系中, 光学支和声学支哪个态密度大? 光学支 为什么?

光学支。
→ 频带更窄, 色散小, 在相同 ω 内覆盖了更多的 k 状态。

11. 密度泛函理论的基本思想?

把电荷密度当作一个基本物理量。系统基态的物理性质是由电子密度决定的; 电子数不变时, 能量泛函对电荷密度的变分可以得到系统基态能量。

12. 在 k 空间, 自由电子的费米面是个球面, 而在过渡到近自由电子近似时, 费米面如何发生畸变?

① 等能面在远离布里渊区边界处, 与自由电子相近, 也是圆。

② 等能面靠近布里渊区边界时, 电子能量随 k 的增加比自由电子慢, 因此等能线偏离圆而向外凸出。

③ 等能面离开布里渊区边界时, 电子能量随 k 的增加比自由电子快, 因此等能线偏离圆而向内收缩。

13. 为什么畸变的费米面在 k 空间所包围的总体积不变?
循环边界条件。

14. Bloch定理推导过程中, $V(x) = V(x+na)$, 对 a 的大小有限制吗?

理论上, 有周期性, Bloch定理就适用, 但当 a 达到 m 的数量级时, 已不可认为是晶体了。单电子近似不再成立, 电子不再共有化。

15. 声子平均自由程的物理意义?

表示单个声子在两次碰撞间的平均移动距离。

16. 弛豫时间在 Boltzmann 方程中的物理意义?

在外场作用下, 电子波矢由于碰撞, 重新恢复平衡所需的时间。

17. $\sigma = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m^*}$ 与 $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}$ 的区别。

① 用 m^* 代替 m_e , 包含了晶格中的周期性势场。

② τ 与温度 T 有关, 只有费米能级附近的电子参与输运过程。

18. 近自由电子近似?

认为晶体中电子受到晶体势场很弱的作用, 由于周期性势场的微扰, 能带在 B 区边界发生分裂,

晶体中电子的行为与自由电子差别不大, 可以用自由电子波函数的线性组合来构成晶体中电子波函数。

即认为空晶格波函数是零级近似, 使用微扰法组成晶体中电子波函数。

19. 紧束缚近似?

认为晶体中的电子像孤立原子的电子一样束缚在原子周围, 当孤立原子相互靠拢时, 能级简并消除, 扩展形成能带。将孤立原子波函数作为零级近似, 根据周期性条件将晶体波函数组成 Bloch 函数形式。

20. Bloch 定理的两个推论

$$\psi_n(\vec{r}, \vec{r} + \vec{R}_l) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \psi_n(\vec{r}, \vec{r})$$

推论①: 周期性势场中运动的电子波函数是周期性调幅的平面波。

②: 常数因子 \vec{R} 的意义是电子波矢; \vec{R} 与 $\vec{R} + \vec{R}'$ 为等价状态, 只需将 \vec{R} 限制在包含所有不等价的 \vec{R} 状态的第一 B 区内。