

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。

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行矢量。
晶面: 平面族。

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: $2ds\sin\theta = n\lambda$.

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: 描述晶格振动的能量子。

格波: 描述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}_h 与之对应？

否。 $e^{i\vec{R}_h \cdot \vec{R}} = 1$, 并不是一一对应的。

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 $\underline{(h_1 h_2 h_3)}$ 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 $|v_h|$ 是否为0。

简并打开是否一定形成禁带？

不一定。一维情况下不一定，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？

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

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. 行射理论依赖于晶格的周期性，但行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，行射极条件还满足吗？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将导致多体问题吗？

不会。因为离子实可以看成一个周期性势场。

10. 频谱关系中，光学支和声学支哪个态密度大？^{高维？}为什么？

光学支。
→ 频带更窄，色散小，在相同dω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动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。单由近似不再成立，电子不再共价化。

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. $\sigma = \frac{n e^2 \tau(E_F)}{m^*}$ 与 $\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m_e}$ 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，当孤立原子相互靠近时，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 波函数形式。

20. Bloch 定理的两个推论

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

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{k} 的意义是电子波矢； \vec{k} 与 $\vec{k} + \vec{K}$ 为等价状态，只需将 \vec{k} 限制在包含所有不等价的 \vec{k} 状态的第一 BZ 内。