Summary on Solid State Physics

Xupeng Yang

目录

1 Crystal Structure

1. 晶体结构 = 晶体点阵 + 结构基元
2. 原胞：• WS 原胞（唯一） • $\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)$
3. 晶体点阵（布拉菲格子）：•$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{a_1} + n_2\boldsymbol{a_2} + n_3\boldsymbol{a_3}$ • 平移对称性：$V(\boldsymbol{r} = \boldsymbol{R_n}) = V(\boldsymbol{r})$
4. 面心立方（fcc）（ABC）（A1）：12 近邻 $\frac{\sqrt{2}}{2}a$，6 次近邻 a • $\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(\boldsymbol{j} + \boldsymbol{k})$ • 点群：O_h
5. 体心立方（bcc）（A2): 8 近邻 $\frac{\sqrt{3}}{2}a$，6 次近邻 a • $\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}(-\boldsymbol{i} + \boldsymbol{j} + \boldsymbol{k})$ • 点群：O_h
6. 六角密堆（hcp）（ABA）（A3)：12 近邻 a，6 次近邻 $\frac{2\sqrt{6}}{3}a$，基元 2 个原子：$(0,0,0)(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2})$
7. 金刚石结构（A4)：4 最近邻，12 次近邻（面心-顶点），$4r_m = \frac{\sqrt{3}}{2}a$，结构较空 • 点群：$O_h$
8. NaCl 型结构（B1）

9. CsCl 型结构（B2）（类似 bcc）：点群：O_h

10. 闪锌矿结构（B3）（类似金刚石）：点群：T_d

11. 纤维锌结构（六角 ZnS）（B4）：点群：C_{6v} • 原子坐标：$(000)(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{3})$ 和 $(00\frac{3}{8})(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{7}{8})$

12. 萤石结构（CaF_2）（C1）

13. 赤铜矿（Cu_2O）（C3）：（O 原子为 bcc 结构）

14. 钙钛矿（$CaTiO_3$）（E）：点群：O_h，基元 5 个原子

15. 对称操作：• 立方体 48 个对称操作；正四面体 24 个对称操作 • 独立对称操作：$1,2,3,4,6,i,m,\bar{4}$，共 32 种组合操作 • n 度螺旋轴，滑移反映面

16. Neumann 定理：晶体的任一宏观物理性质一定具有它所属点群的一切对称性。

17. • 晶向：$[l_1l_2l_3]$，等价晶向:$< l_1l_2l_3 >$ • 晶面：（密勒指数）：(hkl)，等效晶面：$\{hkl\}$，晶面指数＝晶面法线方向和三个坐标轴夹角的方向余弦之比，多用惯用晶胞的基矢做单位进行标注，晶面指数最简单的晶面族，晶面间距最大。（解离面一般指晶面指数较低面）

18. 晶面间距：• 立方晶系：$d_{\mathrm{HKL}} = \frac{a}{\sqrt{\mathrm{H}^2+\mathrm{K}^2+\mathrm{L}^2}}, a = b = c$ • 正方晶系：$d_{\mathrm{HKL}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\mathrm{H}^2+\mathrm{K}^2}{a^2}+\frac{\mathrm{L}^2}{c^2}}}$ • 六角晶系：$\mathrm{d}_{\mathrm{HKL}} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(\mathrm{H}^2+\mathrm{HK}+\mathrm{K}^2)+(\frac{a}{c})^2\mathrm{L}^2}}, a = b \neq c$ • 正交晶系：$\mathrm{d}_{\mathrm{HKL}} = \frac{1}{\sqrt{(\frac{\mathrm{H}}{a})^2+(\frac{\mathrm{K}}{b})^2+(\frac{\mathrm{L}}{c})^2}}, a \neq b \neq c$

19. 倒易点阵：• 倒格矢：$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1\cdot(\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3)}$ • $\boldsymbol{G}_{hkl} = h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3$ • $\boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ • $\boldsymbol{G}_h \cdot \boldsymbol{R}_n = 2\pi m$ • $\Omega^* = \boldsymbol{b}_1 \cdot (\boldsymbol{b}_2 \times \boldsymbol{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$ • $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\boldsymbol{G}_{hkl}|}$ • 同一物理量在正点阵中的表述和在倒易点阵中的表述之间服从 Fourier 变换关系。 • 面心立方，体心立方互为倒易点阵

20. 布里渊区：• 倒易点阵的 WS 原胞，保留了相应布拉维格子的点群对称性，某布里渊区可分为几个完全等同的区域 • 界面方程：$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{G} = \frac{1}{2}G^2$ • 同一种晶体所有布里渊区体积相同 • 简约布里渊区有 N 个波矢可容纳 $2N$ 个电子态（N 为原胞数）

21. 晶体衍射：•Bragg 解释：$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$ or $2d_{HKL}\sin\theta = \lambda$ • 极限条件：$\lambda \leq 2d$（$d \sim$ Å）
    • 局限：只能给出衍射加强，不能给出衍射强度分布，且忽略原子的分布及种类的影响
    • Laue 解释：$\boldsymbol{k}_0 - \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{G}_{HKL}$ • 弹性散射：布里渊区边界 • Eward 图解法
    • Laue 方法：一束连续波长的 X-ray，坐落在最小波矢 k_{min} 和最大波矢 k_{max} 倒格点所代表的晶面族都会发生衍射。 • 粉末衍射法：单色 X-ray，各晶面均衍射 • 旋转晶体法：单色 X-ray，旋转晶体使各晶面均衍射
    • 几何结构因子：$F_{HKL} = \frac{A_b}{A_e} = \sum_{j=1}^{n} f_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}} = \sum_{j=1}^{n} f_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi(Hx_j+Ky_j+Lz_j)}$ • $I \propto |F_{HKL}|^2$ (KBr 原子散射因子相差很多，仍有衍射峰)
    • 中子衍射：吸收小、核散射，磁散射，区别同位素

2 Crystall Binding

考虑 $T=0$ 时，$T\mathrm{d}s=0$

1. 相互作用势：$u(r)=-\frac{a}{r^m}+\frac{b}{r^n}$，平衡条件：$n>m$
2. 相互作用能：$U(r)=\frac{1}{2}\sum_i^N\sum_{j\neq i}^N u_{ij}\left(r_{ij}\right)=\frac{N}{2}\sum_{i\neq 1}^N u_{1i}\left(r_{1i}\right)$ （N 为原胞数）
3. 体弹性模量：$\bullet K=-V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T=V_0\left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_{V_0}=\frac{1}{9\gamma N r_0}\left(\frac{\mathrm{d}^2 U}{\mathrm{d}r^2}\right)_{r_0}$，$V_0$ 为平衡体积 $\bullet -\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}V}\approx P_0\approx 0$ 确定平衡态体积
4. 抗张强度（能够负荷的最大张力）：$P_m=-\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{V_m}$，$r_m$：$\frac{\partial f(r)}{\partial r}\Big|_{r_m}=-\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}\Big|_{r_m}=0$
5. 结合力：• 斥力：同性电荷之间的排斥，Pauli 不相容原理 • 引力：电子的负电荷与原子核正电荷之间的静电吸引作用
6. 离子晶体：• 结合能一般比较大，熔点较高，强度大，硬度高，但质地较脆 • 键没有方向性和饱和性
   • 对 N 个原胞：$U=\frac{1}{2}(2N)\sum_{\mathrm{j}}\left(\pm\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{\mathrm{ij}}}+\frac{b}{r_{\mathrm{ij}}^n}\right)=-N\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\sum_j\pm\frac{1}{a_{ij}}-\frac{1}{r_0^n}\sum_j\frac{b}{a_{ij}^n}\right]=-N\left(\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}-\frac{B}{r_0^n}\right)$ & $\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}\Big|_{r_0}=0$，$V_0=\gamma N r_0^3$，平衡时：$U_0=-N\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1-\frac{1}{n}\right)$
   • 马德龙常数 α（根据晶体结构计算），离子平衡间距 r_0（衍射实验），n（由体弹性模量 K 计算）：$K=\frac{\alpha e^2}{72\pi\varepsilon_0\gamma r_0^4}(n-1)$
7. 共价晶体：• 熔点、硬度和强度由中等到很高都有，不导电 • 键有一定的方向性和饱和性
   • 局域密度泛函理论
8. 金属晶体：• 着大量的自由电子，高的导电性和传热性 • 键没有方向性，且为非定域键可以接受锻压等加工 • 局域密度泛函理论
9. 分子晶体：• 熔点很低，质地软，可以压缩，也不导电 • Van der Waals 结合
   •Lennard-Jones 势（单原子分子）：$u(r)=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right]$
   • 相互作用势：$U(r_0)=2N\varepsilon\left[\mathrm{A}_{12}\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{12}-\mathrm{A}_6\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^6\right]$
10. 氢键晶体：• 熔点和沸点要比没有氢键的同类化合物要高

3 Lattice Vibration

1. 一维单原子链：• 运动方程：$m\frac{\mathrm{d}^2 u_n}{\mathrm{d}t^2}=\beta\left(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_n\right)$ • 方程形式解（格波）：$u_{nq}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-naq)}$
   • 色散关系：$\omega=2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\frac{1}{2}aq\right|$ • 格波的简约性：q 取值范围可以限制在第一布里渊区内
   • 周期性边界条件：$u_{n+N}=u_n\Rightarrow-\frac{N}{2}\leq n\leq\frac{N}{2}$ & $q=\frac{2\pi}{Na}n$ • 分布密度：$\rho(q)=\frac{Na}{2\pi}=\frac{L}{2\pi}$
   • 晶格振动格波的总数 $=N=$ 晶体链的总自由度数
   • $q\to 0\Rightarrow$ 格波 = 弹性波，$v_p=v_q=v_s=\sqrt{\frac{Y}{\rho}}$（声速）
   • $q=\pm\frac{\pi}{a}\Rightarrow v_q=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}=0$，和 X 射线衍射的 Bragg 条件一致

2. 一维双原子链：$\bullet M\frac{\mathrm{d}^2u_{2n}}{\mathrm{d}t^2}=\beta\left(u_{2n+1}+u_{2n-1}-2u_{2n}\right)$，$m\frac{\mathrm{d}^2u_{2n+1}}{\mathrm{d}t^2}=\beta\left(u_{2n}+u_{2n+2}-2u_{2n+1}\right)$

• 形式解：$u_{2n}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-2naq)}$，$u_{2n+1}=B\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\omega t-(2n+1)aq]}$

• 色散关系：$\omega_{\pm}^2=\frac{\beta}{mM}\left[(m+M)\pm\left(m^2+M^2+2mM\cos 2qa\right)^{\frac{1}{2}}\right]$，$-\frac{\pi}{2a}<q\leq\frac{\pi}{2a}$

• $q\ \to\ 0\ \Rightarrow$　声学支：两种原子的运动完全一致，振幅和位相均相同

光学支：相邻原子的相对运动，振动方向相反，质心不动（引起在 ω_+ 附近红外光的强烈吸收）

• 周期性边界条件：晶格振动格波的总数 $=2N=$ 晶体链的自由度数

3. 三维晶格：• 原胞内 n 个原子 $\Rightarrow$ $3n$ 支色散曲线，3 支声学支，一纵二横；$(3n-3)$ 支光学支。

• 晶格振动的波矢数＝晶体的原胞数 N　• 晶格振动的模式数＝晶体的自由度数 $3nN$

4. 态密度：• 一维原子链：$g(\omega)\mathrm{d}\omega=2\frac{L}{2\pi}\mathrm{d}q\ \Rightarrow\ g(\omega)=\frac{L}{\pi}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\omega}$ $(\omega(q)=\omega(-q))$，在布里渊区边界发散 $\to\infty$

• 三维：$\bullet g_j(\omega)=\frac{V}{2\pi^2}q^2\cdot\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\omega}$　$\bullet\ g_j=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2\oiint\frac{dS}{|\nabla_q\omega_j(q)|}$（需另考虑简并 $g(\omega)=\sum_j^{3n}g_j(\omega)$）

• 三维弹性波：$g(\omega)=\frac{3V}{2\pi^2}\cdot\frac{\omega^2}{v_s^3}$（每一个波矢 q 对应三个振动模）（抛物线）

5. 使用的近似：• 最近邻近似　• 简谐近似　• 周期性边界条件近似　• 绝热近似：自由电子和离子实分开处理

6. 振动模式：• 用简正坐标，为上述模式（特解）的线性组合（化为近独立粒子体系）• 能量量子化 $\Rightarrow$ 声子 $\hbar\omega_j$

7. 声子：晶格振动的能量量子　• 为准粒子　• 能量守恒和准动量守恒，粒子数不守恒

• $E=\sum_{j=1}^{3N}\left(n_i+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_i$（总原子数 N）　• 服从 Bose-Einstein 统计　$\bullet\ \bar{n}(\omega_i)=\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega_i}{k_BT}}-1}$

8. Dulong - Petit 定律：$C_{Vm}=3N_Ak_B$ (能量均分定理)

9. Einstein 模型：所有原子都以同一频率 ω_E 在振动　$\bullet\ C_V=3Nk_B\left(\frac{T_E}{T}\right)^2\frac{\mathrm{e}^{\frac{T_E}{T}}}{\left(\mathrm{e}^{\frac{T_E}{T}}-1\right)^2}=3Nk_Bf_E\left(\frac{T_E}{T}\right)$

$\left(T_E=\frac{\hbar\omega_E}{k_B}\right)\sim$ 光学支格波频率

• 高温：$C_V\to 3Nk_B$

• 低温：$C_V=3Nk_B\left(\frac{T_E}{T}\right)^2e^{-\frac{T_E}{T}}$　• 能量量子化才是理解晶格振动问题的关键

10. Debye 模型：• 德拜频率 ω_D（**弹性波**频率上限）　$\bullet\int_0^{\omega_D}g(\omega)\mathrm{d}\omega=3N$ & $g(\omega)=\frac{3V\omega^2}{2\pi^2v_s^3}\ \Rightarrow\ \omega_D$

$\bullet\bar{E}=\int_0^{\omega_D}g(\omega)\frac{\mathrm{h}\omega}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}}-1}\mathrm{d}\omega=9Nk_BT\left(\frac{T}{T_D}\right)^3\int_0^{\frac{T_D}{T}}\frac{x^3}{\mathrm{e}^x-1}\mathrm{d}x$　$\bullet\ C_V=\left(\frac{\partial\bar{E}}{\partial T}\right)_V=9Nk_B\left(\frac{T}{T_D}\right)^3\int_0^{\frac{T_D}{T}}\frac{x^4\mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x-1)^2}\mathrm{d}x$

• 高温：$\mathrm{e}^x\to(1+x)\ \Rightarrow\ C_V\to 3Nk_B$

• 低温：近似积分到 $\infty\ \Rightarrow\ C_V\to\frac{12}{5}\pi^4Nk_B\left(\frac{T}{T_D}\right)^3$（弹性波近似恰好符合低温时的情况）

• 缺陷：忽略了格点的不连续，只有低温下较准确，不足以全面地表述晶格振动的性质

只描述晶格振动，忽略自由电子等对热容的影响

• 德拜温度：$T_D=\frac{\hbar\omega_D}{k_B}$　**分界温度**，在该温度以下，许多模式被冻结，必须使用量子理论处理

11. 热容严格计算：$\bullet\overline{\varepsilon_j}=\frac{1}{2}\hbar\omega_j+\frac{\sum_{n_j}n_j\hbar\omega_j\exp\left(-\frac{n_j\hbar\omega_j}{k_BT}\right)}{\sum_{n_j}\exp\left(-\frac{n_j\hbar\omega_j}{k_BT}\right)}=\frac{1}{2}\hbar\omega_j+\frac{\hbar\omega_j}{e^{\beta\hbar\omega_j}-1}$

$\bullet\bar{E}=\int_0^{\omega_m}\frac{1}{2}\hbar\omega g(\omega)\mathrm{d}\omega+\int_0^{\omega_m}\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1}g(\omega)\mathrm{d}\omega$ & $\int_0^{\omega_m}g(\omega)\mathrm{d}\omega=3N\ \Rightarrow\ C_V$

• 不能用孤立谐振子的方式来描述，而必须用点阵行波（以波矢、频率、偏振性质为表征）的方式来描述。

12. 离子晶体长光学波：• 纵波的极化场增大了原子位移的恢复力，从而提高了振动频率，而横波的极化场对频率基本没有影响 • $\omega_{LO}(0) > \omega_{TO}(0)$
•$M_+\ddot{u}_{2n} = -\beta(2u_{2n} - u_{2n-1} - u_{2n+1}) + e^*\boldsymbol{E}_{eff}$, $M_-\ddot{u}_{2n+1} = -\beta(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}) - e^*\boldsymbol{E}_{eff}$
•$u_+ = u_{0+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$, $u_- = u_{0\_}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$, $\boldsymbol{E}_{eff} = E_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ $(q \to 0)$

13. 离子晶体介电常数：•$\varepsilon_r(\omega) = (n + \mathrm{i}k)^2$ (n 为折射率，k 为消光系数，吸收系数 $\alpha = 2kq$)
•$R = \frac{(n-1)^2+k^2}{(n+1)^2+k^2}$ •$\varepsilon_r(\omega) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 + \frac{\boldsymbol{P}_e}{\varepsilon_0 \boldsymbol{E}} + \frac{\boldsymbol{P}_i}{\varepsilon_0 \boldsymbol{E}} = \varepsilon_r(\infty) + \frac{\varepsilon_r(0)-\varepsilon_r(\infty)}{1-\left(\frac{\omega}{\omega_{\mathrm{TO}}}\right)^2}$ • ω_{LO} 是电磁波传播禁带的高截止频率
•$P_i = ne(u_+ - u_-)$ (离子极距) •$\omega_T < \omega < \omega_L$ 时折射率 $n = 0$，不能在晶体中传播，全反射

14. LST 关系式：$\frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2} = \frac{\varepsilon_r(0)}{\varepsilon_r(\infty)}$

15. 极化激元（电磁激元）：光子 - 横光声子的耦合模式

16. 热膨胀：• 势能曲线不对称 • Morse 势能：$u(r) = D\left[1 - e^{-\lambda(r-a_0)}\right]^2 \approx \frac{1}{2}\beta_0\delta^2 + \frac{1}{6}g_0\delta^3 + \frac{1}{24}h_0\delta^4$
•$\bar{\delta} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty}\delta e^{-\frac{u}{kT}}\,\mathrm{d}\delta}{\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{u}{kT}}\,\mathrm{d}\delta} = -\frac{1}{2}\frac{g_0}{\beta_0^2}k_BT$ (精确到三次项 → 线性热膨胀)

17. 非谐项：• 谐振子之间发生耦合，相互碰撞，能量改变且只有有限的寿命

18. 声子碰撞：• 正常过程；倒逆过程（U 过程） • 能量守恒 & “动量”守恒（波矢的几何干涉条件）

19. 晶格热导（绝缘体导热）：• 等价为声子扩散运动 • 影响因素：声子平均自然程 λ；尺寸效应；杂质和缺陷 • 高温：$\lambda \propto \frac{1}{T}$ • 低温：$\lambda \propto \mathrm{e}^{\frac{T_D}{\alpha T}}$ 但受限于尺寸效应

20. 晶格状态方程：• Gruneishen 近似状态方程 $p = -\frac{\mathrm{d}U_l}{\mathrm{d}V} + \gamma\frac{\bar{E}}{V}$ 其中 $\gamma = -\frac{\mathrm{d}\ln\omega}{\mathrm{d}\ln V}$ 近似为常数
• Gruneishen 定律：$\alpha = \frac{\Delta V/V}{\Delta T} = \frac{\gamma}{K}\frac{C_V}{V}$

21. 非弹性 X-射线散射：•$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{q}$ & $\Omega = \Omega_0 \pm \omega(q)$ • $q \approx 2k_0\sin\theta = 2n\frac{\Omega_0}{c}\sin\theta$ (n 为折射率)
• 不断改变角度可测出某条色散曲线 • 改变入射晶体的方向测出不同色散曲线

22. 非弹性可见光散射：• 布里渊区中心声子 • Raman 散射：光学声子，漂移较大，不明显依赖于散射角 • Brilouin 散射：声学声子，漂移较小

23. 红外吸收光谱：• 横光学支声子吸收 $\omega = \omega_{TO}$，布里渊区中心声子

24. 非弹性中子散射：• 在整个布里渊区内进行，相同波长能量更小，方便分辨能量变化
•$\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{N}}}\left(k^2 - k_0^2\right) = \pm\hbar\omega_j(q)$ & $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{q}$

4 Free Electron Theory

1. Drude-Lorentz 模型：• 基本假设：1.金属由电子和正电离子实组成 2.电子质量小，可自由移动（不考虑相互作用，平衡态速度满足 Maxwell-Boltzmann 分布） 3.离子实质量大，基本不动 4.电子会被外加电磁场驱动偏离平衡 5.电子受到离子实的无规散射，回覆平衡
• 直流电导：$\frac{dv}{dt} = \frac{\boldsymbol{F}(t)}{m} - \frac{v}{\tau}$ $\Rightarrow$ $\boldsymbol{v}(t) = \boldsymbol{v}(0)\mathrm{e}^{-t/\tau} - \frac{e\boldsymbol{E}\tau}{m}\left[1 - \mathrm{e}^{-t/\tau}\right]$ $\Rightarrow$ $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} = \frac{ne^2\bar{l}}{mv_T}$ 由于 $\bar{l} \sim a$ & $\sigma \sim \frac{1}{T}$ $\Rightarrow$ $n \propto \frac{1}{\sqrt{T}}$ ×

2. 热输运：$\bullet \kappa = \frac{1}{3}C_V v_T \bar{l}$

3. Wiedemann-Franz 定律：$\bullet \frac{\kappa}{\sigma} = \frac{3}{2}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 T = L_{\text{Lorentz}} T$ • 实验上在 10-100K 范围内 Lorenz 常数变化（非弹性散射主导）

4. Hall 效应：• 无散射：平行电场方向上粒子无净运动 • 有散射：平行和垂直电场方向均有电流
   • Hall 系数 $(J_y = 0)$：$R_H = \frac{E_y}{J_x B} = \frac{1}{n(-e)}$ $\Rightarrow$ 测量载流子浓度
   • 磁阻为 0 × 所有电子具有相同弛豫时间过于简化

5. 缺陷：• 电子可以自由地参与导电和导热，但是对热容没有贡献 • 热容，热导率，电导率，平均自由程，Lorenz 数均不准确 • 无法解释正 Hall 系数（只有价电子载流） • 无法解释电阻随温度降低而降低 • 无法解释磁化率，超导等

6. 量子自由电子论：• 基本假设：1.保持 Drude 自由电子假设 2. 单个电子服从量子力学，具有确定的量子数和能量，但除此之外波动性不起作用 3. Fermi-Dirac 统计

7. 超简统计物理（无相互作用）：$\overline{O} = \sum_n f_n O_n$ $f_n = \frac{1}{e^{(\varepsilon_n-\mu)/k_BT}+\alpha}$

8. 金属单电子态：• 自由独立近似，$V(\boldsymbol{r})$ 为常数 $\Rightarrow$ $\varphi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ (V 为体积)
   • 周期性边界条件：导致波矢量子化 $k_i = \frac{2\pi}{L_i} n_i$ • 态密度：$\rho(\boldsymbol{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$ • $g(\varepsilon) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \oiint_{\varepsilon(\boldsymbol{k})=\varepsilon} \frac{dS_{\boldsymbol{k}}}{|\nabla_{\boldsymbol{k}}\varepsilon(\boldsymbol{k})|}$
   • $\sum_{\boldsymbol{k},s} O(\boldsymbol{k}) = N_s V \int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} O(\boldsymbol{k})$ • $\sum_{\boldsymbol{k},s} O(\varepsilon(\boldsymbol{k})) = \int d\varepsilon O(\varepsilon) g(\varepsilon)$ • $g(\varepsilon_F) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon_F} = \frac{3}{2}\frac{N}{\varepsilon_F}$

9. Fermi 统计：• 强简并：低温时 $T \ll T_F$，指量子全同性重要与否，只有费米面附近的态参与激发
   $\bullet \mu - \varepsilon_F \approx -\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 \frac{g'(\varepsilon_F)}{g(\varepsilon_F)}$

10. 电子热容：• Sommerfeld 展开：$C_e = \frac{\pi^2}{3} g(\varepsilon_F) k_B^2 T = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F} = \gamma T$ • 低温下表现：$C = C_e + C_v = \gamma T + bT^3$ • 低温电子热容测量可反映金属费米面态密度

11. 热有效质量 m_{th}：$\frac{m_{th}}{m} = \frac{\gamma(\text{observed})}{\gamma(\text{free})}$

12. Pauli 顺磁磁化率：• 一般求解方法：$N = N_\uparrow + N_\downarrow = \sum_{\boldsymbol{k}} f(\varepsilon_\uparrow(\boldsymbol{k})) + \sum_{\boldsymbol{k}} f(\varepsilon_\downarrow(\boldsymbol{k}))$ $\Rightarrow$ μ & $M = \mu_B(N_\uparrow - N_\downarrow) = \mu_B \sum_{\boldsymbol{k}} f(\varepsilon_\uparrow(\boldsymbol{k})) - \mu_B \sum_{\boldsymbol{k}} f(\varepsilon_\downarrow(\boldsymbol{k}))$
    • 低温弱场：$\mu \approx \varepsilon_F$ $\Rightarrow$ $M = \Delta N \mu_B \approx g(\varepsilon)\mu_B^2 B$

13. 直流电导：$J \sim n\frac{|\delta\boldsymbol{k}|}{k_F} v_F = n\frac{e\tau_F E}{\hbar k_F}\frac{\hbar k_F}{m} = \frac{ne^2\tau_F}{m}E$

14. 热导率：$\kappa = \frac{1}{3}C_e v_T^2 \tau = \frac{\pi^2 N k_B^2 T}{3m}\tau_F$

15. Wiedemann-Franz 定律：$L_{\text{Sommerfeld}} = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2$

16. 热电子发射：• Richardson-Dushmand 公式：$J_s = \lambda A_0 T^2 e^{-\frac{W}{k_BT}}$ (不同材料 λ 有区别)

17. 场致发射（Schottky 效应）：$J_s = AT^2 \exp\left\{-\frac{W}{k_BT}\right\} \exp\left\{\frac{e\sqrt{eE/4\pi\varepsilon_0}}{k_BT}\right\}$

18. 接触电势：$V_A - V_B = (W_A - W_B)/e$ $E_F = -W - qV$

19. 模型不足：• 电子密度实际很大，没有考虑相互作用，相互碰撞（碰撞对电导无影响，对热学性质有影响） • 平均自由程应和 a 同量级，但实验发现不是 • 只有价电子参与 • Hall 系数符号和大小问题

20. 相互作用：• Landau Fermi 液体理论：如果相互作用不导致能隙，则低能的元激发和独立粒子类似，零温下仍然存在 Fermi 面 • 对于电子气体，密度越大，电子越接近独立电子行为

5 Bloch Theory

1. Bloch 定理：对于晶格势场满足 $V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_l)=V(\boldsymbol{r}) \quad\Rightarrow\quad$ 平移算符 $[T_{\boldsymbol{R}},T_{\boldsymbol{R}'}]=0 \quad [T_{\boldsymbol{R}},H]=0$ & $\psi_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$，其中 $u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_l)=u_{n\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ • 电子波函数变为调幅平面波

2. 晶格波矢：• 周期性边界条件：$\boldsymbol{k}=\frac{h_1\boldsymbol{b}_1}{N_1}+\frac{h_2\boldsymbol{b}_2}{N_2}+\frac{h_3\boldsymbol{b}_3}{N_3}$ • 分布密度：$\rho(\boldsymbol{k})=\frac{V}{(2\pi)^3}$

3. 近自由电子：• 晶格周期势场的 Fourier 变换只有 $\boldsymbol{k}$ 是倒格矢才不为零 • 周期场只会把波矢为 $\boldsymbol{k}$ 的态和波矢为 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}_m$ 的态耦合起来
   • 空格子模型：$V(\boldsymbol{r})\equiv 0$，但满足平移对称性
   - 非简并：$\varepsilon(\boldsymbol{k})=\varepsilon_0(\boldsymbol{k})+U_0+\sum_{\boldsymbol{G}_m\neq 0}\frac{|U_{\boldsymbol{G}_m}|^2}{\varepsilon_0(\boldsymbol{k})-\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}_m)}$
     $|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle=|\boldsymbol{k}\rangle+\sum_{\boldsymbol{G}_m\neq 0}\frac{UG_m}{\varepsilon_0(\boldsymbol{k})-\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}_m)}|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}_m\rangle$
     $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\langle\boldsymbol{r}|\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle=\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\left[1+\sum_{\boldsymbol{G}_m\neq 0}\frac{U_{G_m}}{\varepsilon_0(\boldsymbol{k})-\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}_m)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{G}_m\cdot\boldsymbol{r}}\right]$
   - 简并情况：$\varepsilon_\pm(\boldsymbol{k})=\frac{\varepsilon_0(\boldsymbol{k})+\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{[\varepsilon_0(\boldsymbol{k})-\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})]^2+4\,|U_{\boldsymbol{G}}|^2}$
     若 $\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})-\varepsilon_0(\boldsymbol{k})\ll|U_{\boldsymbol{G}}| \quad\Rightarrow\quad \varepsilon_\pm(\boldsymbol{k})=\frac{\varepsilon_0(\boldsymbol{k})+\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})}{2}\pm\left\{|U_{\boldsymbol{G}}|+\frac{[\varepsilon_0(\boldsymbol{k})-\varepsilon_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})]^2}{8|U_{\boldsymbol{G}}|}\right\}$
     $\psi^-(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_k(x)+\psi_{-k}(x)]=\frac{1}{\sqrt{2L}}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi x}{a}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{n\pi x}{a}}\right]=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{n\pi x}{a} \qquad \psi^+(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_k(x)-\psi_{-k}(x)]=\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi x}{a}$
     禁带宽度：$E_g=2|U_{\boldsymbol{G}}|$

4. Kronig-Penney model：• 简化周期势模型（势阱 a，势垒宽 b，势垒高度为 V_0），设 $\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}Kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Kx}, 0<x<a \quad \psi(x)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}Qx}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Qx}, -b<x<0$
   • If $\varepsilon>V_0 \quad \cos k(a+b)=-\frac{Q^2+K^2}{2KQ}\sin Qb\sin Ka+\cos Qb\cos Ka$
   • If $\varepsilon<V_0 \quad \cos k(a+b)=\frac{Q^2-K^2}{2KQ}\sinh Qb\sin Ka+\cosh Qb\cos Ka$
   •$\varepsilon=\frac{\hbar^2K^2}{2m}$ • 取 δ 势近似：$\cos ka=\mp P\frac{\sin Ka}{Ka}+\cos Ka=f(K)$ 需满足 $|f(K)|\le 1$ 有解

5. 高维情况：可能存在能带交叠

6. 紧束缚近似：$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_m a_m\varphi_i(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_m)$ 有解 $a_m=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_m}$
   •$\varepsilon(\boldsymbol{k})=\varepsilon_i-J(\boldsymbol{k})/\Phi(\boldsymbol{k}) \quad \psi_{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{r})=C\sum_m\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_m}\phi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_m)$
   • 最近邻近似：$\varepsilon(\boldsymbol{k})=\varepsilon_0-J_0-\sum_{\boldsymbol{R}_s\in\langle NN\rangle}J(\boldsymbol{R}_S)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_s}$（求和只涉及最近邻） • 一维 s 态能带：$\varepsilon_s(k)=\varepsilon_s-J_0-2J_1\cos(ka)$
   • 简立方晶格 s 态能带：$\varepsilon_s(k)=\varepsilon_s-J_0-2J_1[\cos(k_xa)+\cos(k_ya)+\cos(k_za)]$ 能带宽度：$12J_1$ 能量越高，能带越宽

- 简立方晶格 p 态能带：x, y, z 三个 p 轨道各形成能带 $\varepsilon_{p_x}(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_p - J_0 - 2J_1\cos(k_x a) - 2J_2[\cos\left(k_y a\right) + \cos(k_z a)]$
- 不同轨道交叠积分 $\rightarrow$ 轨道杂化

7. Bloch 定理中的近似：• 绝热近似：分离电子与原子核的运动 • Hatree-Fock 平均场近似（多体 $\rightarrow$ 单体）：其余电子对一个电子的相互作用等价为一个不随时间变化的平均场 • 周期场近似

8. 能带计算方法：• 平面波法：$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{G}} a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}}$ 无穷阶方程需截断，但收敛速度很慢，在离子实附近，电子波函数随空间强烈地振荡。要描述这种剧烈振荡行为，需要非常多的高频波矢。
   • 原胞法：假设 $U(\boldsymbol{r})$ 只有这个 WS 原胞里的离子决定，并且满足边界条件：$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$ & $\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r})\cdot\nabla_r u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{n}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})\cdot\nabla_r u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})$
   • 缀加（增广）平面波法：muffin-tin 势，离子实内部利用球对称解出波函数，离子实外部为平面波组合，在离子实表面连续
   • 格林函数法：muffin-tin 势，通过格林函数计算平面波受到离子实的散射幅度来得到能谱关系的
   • 正交平面波法：和原子轨道正交化的 OPW 波函数：
   $|OPW_{\boldsymbol{k}}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle - \sum_{i,l}\left|\phi_{i\boldsymbol{R}_l}\right\rangle\langle\phi_{i\boldsymbol{R}_l}\left|\boldsymbol{k}\right\rangle = \left[1 - \sum_{i,l}\left|\phi_{i\boldsymbol{R}_l}\right\rangle\langle\phi_{i\boldsymbol{R}_l}\right|\left]|\boldsymbol{k}\right\rangle$ $\quad |\psi_{\boldsymbol{k}}\rangle = \sum_{\boldsymbol{G}} a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}\,|OPW_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}\rangle$
   • 赝势法：$\left[\hat{T} + V_{ps}\right]|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle = \varepsilon(\boldsymbol{k})\,|\phi_{\boldsymbol{k}}\rangle$ $\quad V_{ps} = V + \sum_{il}(\varepsilon(\boldsymbol{k}) - \varepsilon_i)\,|\phi_{il}\rangle\langle\phi_{il}|$ • 密度泛函理论：一个粒子数确定的电子体系的基态能量和波函数仅由其电子数密度 $n(\boldsymbol{r})$ 所决定。

9. 能带对称性：• 点群对称：对称操作 α，对于非简并能带有 $\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_n(\alpha\boldsymbol{k})$ 取区域为第一布里渊区的 $1/f$，f 为晶体点群对称操作元素数 $\rightarrow$ 不可约体积
   • 时间反演对称：$\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_n(-\boldsymbol{k})$ $\quad \varepsilon_{n,\sigma}(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_{n,-\sigma}(-\boldsymbol{k})$ • 一维空晶格的分析，二维方格子的分析

10. 能态密度：• 默认自旋简并（结果加倍） • $g(\varepsilon) = \frac{1}{V}\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}\varepsilon}$ • 近自由电子的态密度：半导体：带低附近：$g_c(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_c^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c}$ • 紧束缚近似态密度：• van Hove 奇点：$\nabla\varepsilon_s(\boldsymbol{k}) = 0$，态密度微分发散

11. 近自由电子的 Fermi 面：• 具有镜面对称的晶体里，等能面总是和布里渊区边界垂直 • 二维正方晶格：$\eta N = 2\rho(\boldsymbol{k})\pi k_F^2 \;\Rightarrow\; \frac{k_F}{k_1} = \sqrt{\frac{2\eta}{\pi}}$ (其中 k_1 为简约区内切圆半径，η 为每个原子的价电子)
    • 一般晶格里 Fermi 面的构造：Harrison 方法 • 分析 Fermi 面形状：与距布里渊区边界最小值比值大小 $\frac{k_F}{k_{min}}$ • 二价金属：2 个价电子但跨越第一第二布里渊区，都未填满，还为导体

6 Semiclassical

1. 适用条件：• 能带指标 n 为运动场数，电子总待在同一能带中，忽略带间跃迁可能性。即，外场频率满足 $\hbar\omega \ll \varepsilon_g$ • 外场波长 $\lambda \gg$ 晶格常数 a，可认为电子为波包。

2. • 电子平均速度：$\boldsymbol{v} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}}\varepsilon_n(\boldsymbol{k})$ • $\dot{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{F}$

3. • 倒有效质量：$\overleftrightarrow{m}^{*-1} = \nabla_{\boldsymbol{k}}\nabla_{\boldsymbol{k}}\varepsilon_n(k)/\hbar^2$ • 对称张量 • 导体中参与行为的电子 $|\Delta\boldsymbol{k}| \ll \frac{\pi}{a} \Rightarrow \overleftrightarrow{m}^*$ 基本不变
   • 有效质量的测量：$C_v = \gamma T \propto= m^* T$ • 重费米子：$m^* > 100 m_e$ (紧束缚近似)
   m^* 越大，态密度越大

4. 加速度 $\boldsymbol{a} = \overleftrightarrow{m}^{*-1} \cdot \boldsymbol{F}$

5. • 等能面：$\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*}$ • 一般为椭球面

6. 恒定电场下的 Bloch 震荡：• k 空间中匀速运动：$\dot{k} = F/\hbar = eE/\hbar$ • 实空间周期运动
   • 震荡周期 (不考虑散射)：$T = \oint_{BZ} dt = \oint_{BZ} \frac{dk}{\dot{k}} = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\hbar dk}{eE} = \frac{2\pi\hbar}{eEa}$
   • 观测要求：震荡周期 $T \lesssim$ 平均散射间隔 $\tau(\sim 10^{-14}s)$ $\Rightarrow$ 半导体超晶格

7. 强场下的 Zener 隧穿：• 电子实空间位置改变 • 获得能量：$eEd = \mathcal{E}_{gap}$

8. 包络波函数和有效质量近似：•$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \Psi_n(\boldsymbol{r},t)\psi_{n\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})$ ($\psi_{n\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})$ 是周期场里的本征波函数)
   •$i\hbar\partial_t\Psi_n(\boldsymbol{r},t) = \mathcal{H}_n\Psi_n(\boldsymbol{r},t)$ •$\mathcal{H}_n \approx \varepsilon_n(\boldsymbol{k}_0) + (\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})\frac{1}{2\overleftrightarrow{m}^*}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}) + U$

9. 时间反演：•$\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_n(-\boldsymbol{k})$，$\boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) = -\boldsymbol{v}_n(-\boldsymbol{k})$ •$\varepsilon_{n\sigma}(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_{n-\sigma}(-\boldsymbol{k})$，$\boldsymbol{v}_{n\sigma}(\boldsymbol{k}) = -v_{n-\sigma}(-\boldsymbol{k})$ (自旋轨道耦合)

10. 电流：•$\varepsilon_{空穴} = -\varepsilon_{缺失电子}$ $(\mu = 0)$ •$\boldsymbol{k}_{空穴} = -\boldsymbol{k}_{缺失电子}$ •$\boldsymbol{v}_{空穴} = \boldsymbol{v}_{缺失电子}$ •$m_h^*(\boldsymbol{k}) = -m_e^*(\boldsymbol{k})$

11. 几何相位：•$i\langle u_{nk} | \nabla_{\boldsymbol{k}} u_{n\boldsymbol{k}}\rangle = \mathcal{A}_n(\boldsymbol{k})$ •$\theta_n(\boldsymbol{k}+\xi) = \theta_n(\boldsymbol{k}) + \xi \cdot \mathcal{A}_n(\boldsymbol{k})$ •$\Omega_n(\boldsymbol{k}) = \nabla_{\boldsymbol{k}} \times \mathcal{A}_n(\boldsymbol{k})$
    •$\boldsymbol{r}_c(t) = \boldsymbol{r}_c(0) + \mathcal{A}_n(\boldsymbol{k}_c) + \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}_c)t$ •$\hbar\dot{\boldsymbol{k}}_c = -e\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_c,t) - e\dot{\boldsymbol{r}}_c \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}_c,t)$
    •$\dot{\boldsymbol{r}}_c = \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}_c) + \dot{\boldsymbol{k}}_c \times \Omega_n(\boldsymbol{k}_c)$
    反常霍耳效应：没有外加磁场时的 Hall 效应

12. 金属 - 绝缘体转变 (MIT)：• Peierls 相变: 一维单原子链总会二聚化
    • Bismuth 晶格结构: 简立方晶格畸变，晶格内含偶数个电子

13. 恒定磁场中的准经典运动: • 电子沿着垂直于 B 的平面和等能面的交线运动
    • $\omega_c = \frac{eB}{m_c^*}$ (回旋有效质量) • 电子在实空间的轨道为 k 空间轨道绕磁场 90^o 并乘以因子 $\frac{\hbar}{eB}$ 得到

14. 半经典量子化: • Bohr-Sommerfeld 量子化规则: $\oint \boldsymbol{p} \cdot d\boldsymbol{r} = (n+\gamma)h$ • $R_n^2 = nl_c^2 = n\frac{2\hbar}{eB}$
    • 量子磁通：$\Phi_0 = \frac{h}{e} = \pi l_c^2 B$ • $\varepsilon_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c = \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{n+\frac{1}{2}}{l_C^2}$ • 量子化能级简并度: $\Omega_L = \frac{\Phi}{\Phi_0}$ (不考虑自旋简并)
    • 二维 de Haas-van Alphen (dHvA) 效应: 磁矩 M 是以 $\frac{N}{\Omega_L}$ 为周期振荡，周期 $\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{1}{n_e\Phi_0}$
    • Shubnikov-de Haas 效应：物理量随磁场震荡行为
    • 三维 dHvA 效应：• 量子化条件：$eBA_r = (n+\gamma)h$ 即 $A(\varepsilon_n, k_\parallel) = \frac{2\pi(n+\gamma)eB}{\hbar}$，$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_F}$

15. 磁场中电子、空穴轨道

16. 磁场中的开放轨道：在强磁场极限，某一方向电导趋于零，但另一方向电导趋于饱和；封闭轨道：在强磁场极限，电导趋于零。

17. 量子 Hall 效应：$\sigma_{yx} = \nu G_0 = \nu e^2/h$

18. 电子回旋共振：需满足 $\omega_c\tau \gg 1$(低温，干净样品)，测量 m^*：$\frac{1}{m_c^*} = \sqrt{\frac{\alpha^2 m_x^* + \beta^2 m_y^* + \gamma^2 m_z^*}{m_x^* m_y^* m_z^*}}$

19. Azbel’-Kaner 共振: 条件为 $\omega = n\omega_c$

20. 软 X 射线：$I \propto Tg(\omega)f(\omega)$

21. 扫描隧道显微镜：表面态密度，$\frac{\mathrm{d}j}{\mathrm{d}V} \propto Tg(\varepsilon_F + eV)$

22. 角分辨光电子谱：表面态密度

7 Boltzmann Equation

1. $\bullet \frac{\partial f_n}{\partial t} = \frac{\partial f_n}{\partial t}\Big|_{drift} + \frac{\partial f_n}{\partial t}\Big|_{scatt}$ $\bullet \frac{\partial f_n}{\partial t}\Big|_{drift} = -\boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} f_n - \frac{\boldsymbol{F}}{\hbar} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} f_n$
   $\bullet \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{\mathrm{scatt}} = \int \frac{d\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3} \left\{P(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')[1 - f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)] f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t) - P(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})[1 - f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t)] f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)\right\}$ (P 为跃迁几率)
   $\bullet$ 平衡态：$P(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = P(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ (弹性散射)

2. 驰豫时间近似: $\frac{\partial f_n}{\partial t}\Big|_{scatt} = -\frac{f_n - f_n^{(0)}}{\tau_n(\boldsymbol{k})} \Rightarrow f_n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) = f_n^{(0)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}) + \Delta f_n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t = 0) e^{-t/\tau_n(\boldsymbol{k})}$

3. 直流电导：$\bullet$ 设分布函数空间均匀 $\nabla_{\boldsymbol{r}} f_n = 0$，采取弛豫时间近似 $\bullet \frac{\partial f_n}{\partial t} = +\frac{e\boldsymbol{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} f_n - \frac{f_n - f_n^{(0)}}{\tau_n(\boldsymbol{k})}$
   $\bullet$ 线性输运区间：$f_n^{(1)} = \frac{e\tau_n(\boldsymbol{k})}{\hbar} \boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} f_n^{(0)} \Rightarrow f_n(\boldsymbol{k}) = f_0[\varepsilon_n(\boldsymbol{k})] + \frac{e\tau_n(\boldsymbol{k})}{\hbar} \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) \frac{\partial f_0[\varepsilon_n(\boldsymbol{k})]}{\partial \varepsilon} \simeq f_0[\varepsilon_n(\boldsymbol{k} + e\boldsymbol{E}\tau_n/\hbar)]$
   $\Rightarrow \delta \boldsymbol{k} = -\frac{e\boldsymbol{E}\tau_n(\boldsymbol{k})}{\hbar}$
   $\bullet \overleftrightarrow{\sigma}_n = \int \mathrm{d}\varepsilon \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right)$ $\bullet \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon) = g(\varepsilon) \left\langle e^2 \tau_n(\boldsymbol{k}) \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) \boldsymbol{v}_n(\boldsymbol{k}) \right\rangle_{\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon}$ 各向同性 $\Rightarrow$ $\overleftrightarrow{\sigma}_n = \frac{1}{3} g(\varepsilon) e^2 \tau_n(\varepsilon) \boldsymbol{v}_n^2(\varepsilon) \hat{I}$
   带顶带底 $\Rightarrow$ $\overleftrightarrow{\sigma}_n = \frac{ne^2\tau_F}{m^*}$
   $\bullet$ 强简并极限（金属）：$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \Rightarrow \sigma_n = \sigma_n(\varepsilon_F)$ $\bullet$ 弱简并极限（半导体）：$f_0 \simeq \mathrm{e}^{-(\varepsilon - \mu)/k_B T}$

4. 扩散和导热率：$\bullet \boldsymbol{J}_Q = \int \boldsymbol{v}(\varepsilon - \mu) f \mathrm{d}\varepsilon$
   $\bullet f_n^{(1)} = \tau_n \boldsymbol{v}_n \cdot \left[\nabla_{\boldsymbol{r}} \mu + \frac{(\varepsilon_n - \mu)}{T} \nabla_{\boldsymbol{r}} T\right] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + e\tau_n \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{v}_n \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = e\tau_n \boldsymbol{v}_n \cdot \left[\tilde{\boldsymbol{E}} + \frac{(\varepsilon_n - \mu)}{T} \nabla_{\boldsymbol{r}} T\right] \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ 其中 $\tilde{\boldsymbol{E}} = \boldsymbol{E} + \nabla_{\boldsymbol{r}} \mu / e$

5. $\bullet$ 扩散：$\boldsymbol{J} = \overleftrightarrow{\sigma}_n \tilde{\boldsymbol{E}} = e \overleftrightarrow{D}_n \nabla_{\boldsymbol{r}} n + \overleftrightarrow{\sigma}_n \boldsymbol{E}$ 其中 Einstein 关系：$\overleftrightarrow{D}_n = \frac{1}{e^2} \frac{\partial \mu}{\partial n} \overleftrightarrow{\sigma}_n$ 各向同性 $\Rightarrow$ $D = \frac{\mu_{\mathrm{mobility}}}{e} \frac{\partial \mu}{\partial \ln n}$ $\bullet$ 强简并：$\mu \simeq \varepsilon_F \propto n^{\frac{2}{3}} \Rightarrow D = \frac{2\mu_{\mathrm{mobility}} \varepsilon_F}{3e}$ $\bullet$ 弱简并：$\frac{\mu}{k_B T} = \ln \frac{N}{z} \Rightarrow D = \frac{\mu_{\mathrm{mobility}} k_B T}{e}$
   $\bullet$ 多种载流子：$\boldsymbol{J} = eD_e \nabla_{\boldsymbol{r}} n_e + n_e e \mu_e - eD_h \nabla_{\boldsymbol{r}} n_h + n_h e \mu_h$

6. 热导率：$\bullet$ Onsager 关系：广义流 $J_i = \sum_j L_{ij} F_j$，有 $L_{ij} = L_{ji}$ (时间反演对称性)
   $\bullet \overleftrightarrow{L}_{11} \simeq \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon_F)$ $\overleftrightarrow{L}_{12} = \overleftrightarrow{L}_{21} \simeq -\frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3e} \overleftrightarrow{\sigma}'_n(\varepsilon_F)$ $\overleftrightarrow{L}_{22} \simeq -\frac{\pi^2 (k_B T)^2}{3e^2 T} \overleftrightarrow{\sigma}_n(\varepsilon_F)$
   $\bullet$ 令 $\boldsymbol{J} = 0$，$\boldsymbol{J}_Q = -\overleftrightarrow{\kappa} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}} T$ 其中 $\overleftrightarrow{\kappa} = \frac{1}{T}[\overleftrightarrow{L}_{22} - \overleftrightarrow{L}_{11}^{-1} \overleftrightarrow{L}_{12}] \simeq \overleftrightarrow{L}_{22} \simeq \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e^2} \overleftrightarrow{\sigma}_n$
   $\bullet$ Wiedmann-Franz 定律：$\frac{\kappa}{T\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2$

7. 热电效应：$\bullet J = 0 \Rightarrow \boldsymbol{E} = L_{11}^{-1} L_{12} \frac{-\nabla r T}{T} = \epsilon \nabla_{\boldsymbol{r}} T$ 其中 ϵ 为单位电流携带的熵 ($\nabla_{\boldsymbol{r}} T = 0$ 时,$\boldsymbol{J}_Q = T\epsilon \boldsymbol{J}$)
   $\bullet$ Seebeck 系数：$\epsilon = \frac{L_{11}^{-1} L_{12}}{T} = \frac{-\pi^2 k_B T}{3e} \frac{\sigma'(\varepsilon_F)}{\sigma(\varepsilon_F)}$

8. Peltier 效应：不同导体界面上放热或吸热 $\boldsymbol{J}_Q = T(\epsilon_A - \epsilon_B) \boldsymbol{J}$

9. Matthiessen 定则：散射不强时，不同散射机制可简单叠加：$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{imp}} + \frac{1}{\tau_{ph}} + \cdots$

10. Boltzmann 方程局限性：$\bullet$ 粒子性占主导，在扩散极限成立：样品尺寸远大于平均自由程和相干长度 $\bullet$ 散射之间没有关联

8 Super Conductor

1. 反常特点：• 临界磁场（Type 1）：$H_c(T) = H_c(0)\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$ $\frac{\mathrm{d}H_c(0)}{\mathrm{d}T} = 0$ • 临界电流：超导消失，等价于临界磁场 • Meissner 效应：超导为完美抗磁体，非完美导体，为热力学性质（与历史无关）；可能存在能隙（波函数的“刚性”）

2. 热力学性质：$G_s(T,H) = G_s(T,0) + \frac{1}{2}\mu_0 H^2$ $G_N(T,0) = G_N(T,H) + G_s(T,0) + \frac{1}{2}\mu_0 H_c^2$ • $T < T_c$，一级相变 $T = T_c$，二级相变

3. London Theory：•$\nabla\times\boldsymbol{J} + \frac{n_s e^2}{m}\boldsymbol{B} = \mathrm{Const}$ • $\nabla^2\boldsymbol{B} = \frac{1}{\lambda_L^2}\boldsymbol{B}$ 其中穿透长度 $\lambda_L = \sqrt{\frac{m}{n_s e^2}}$

4. 超导体的热容结果暗示着存在能隙：$C_s/C_n \sim (\Delta/k_B T)^2\,\mathrm{e}^{-\Delta/k_B T}$

A Common Formulas

1. $\int_0^\infty x^k \mathrm{e}^{-ax} = \frac{1}{a^{k+1}}\Gamma(k+1)$ $(a > 0\ \&\ k > -1)$

2. $\int_0^\infty \frac{x^3}{\mathrm{e}^x-1}\mathrm{d}x = \int_0^\infty x^3\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x\sum_{s=0}^\infty \mathrm{e}^{-sx} = \sum_{s=0}^\infty \frac{6}{(s+1)^4} = \frac{\pi^4}{15}$

3. Sommerfeld Expand(低温): $I = \int_0^\infty I(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\mu I(\varepsilon)d\varepsilon + \frac{\pi^2(k_BT)^2}{6}I'(\mu) + \frac{7\pi^4(k_BT)^4}{360}I^{(3)}(\mu) + \cdots$