

《固体物理基础》知识总结

因本课程与其他课程相比理解起来稍有难度,故我们对课程的总结大多只能局限于基础知识的层面。本课程知识点的零散也给我们的复习带来了难度。以下是我在复习中所总结的重要知识点与相关公式,谈不上十分全面和十分准确,但对我的复习还是起到了很大的帮助作用。因我的课业水平有限,其中的很多错误和疏漏之处希望老师斧正。

第一章 微观粒子的状态

每个光(量)子携带的能量 $E = h\nu = \hbar\omega$, 其中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $\omega = 2\pi\nu$, 动量 $p = mc = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda}$;

德布罗意公式 $p = \frac{h}{\lambda} n = \hbar k$, 其中 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, 即物质波的波长 $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$;

不确定性原理: $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$, $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$, 即无法同时准确测得粒子的动量与位置;

当体系的作用量可以与普朗克常数 \hbar 相比拟时, 此时经典力学将不再适用;

平面波函数的形式为: $\phi = e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - Et)}$, 含时薛定谔方程: $i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V\phi$ 。

若考虑定态(势场恒定)问题, 利用分离变量法可得: $\phi = \psi(r)f(t)$, 其中 $f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$,

即可得到定态薛定谔方程: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V\psi(r) = E\psi(r)$, 求解定态薛定谔方程即可求

解波函数; 动量算符 $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, 动能算符 $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = \frac{p^2}{2m}$, 能量算符(哈密顿算符)

$\hat{H} = \hat{T} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$ 。定态薛定谔方程 $\hat{H}\psi(r) = E\psi(r)$ 即为哈密顿算符的本征值方

程, 其解即为能量本征值和本征态。波函数反映了大量粒子分布的概率, 波函数在空间某一点的强度(幅度的平方)与粒子出现在该点的概率成正比, 即概率密度 $w = \phi\phi^* = |\phi|^2$,

波函数满足单值性, 有限性, 连续性和归一性, 即 $\int |\phi|^2 d\tau = 1$;

求解一维无限深势阱模型 $|x| < a$, 可得其能级为 $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} n^2$, 每个能级对应的本

征函数为: $\psi_n(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq a \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right], & |x| < a \end{cases}$, 其能级间隔不均匀, 相邻能级的间隔为:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}(2n+1);$$

一维线性谐振子的势函数 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ，能级为 $E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega$ ，零点能 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ，

能级间隔均匀，相邻能级的间隔为 $\hbar\omega$ ；

求解**氢原子模型**可得能级为 $E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$ 。四个量子数：主量子数 n （决定电子的能量），

角量子数 l （决定电子的轨道角动量），磁量子数 m_l （决定轨道角动量的空间取向），自旋

磁量子数 m_s （决定自旋角动量的空间取向），各量子数的取值为： $n, l(0,1,2,\dots,n-1), m_l$

$(0,\pm 1,\pm 2,\dots,\pm l), m_s\left(\pm \frac{1}{2}\right)$ ，能级 $2n^2$ 度兼并（考虑自旋）；

泡利不相容原理：一个原子内部不可能同时有两个或两个以上的电子具有完全相同的量子数，即原子中没有任何两个电子可以有完全相同的状态。

以上三类为**束缚态模型**，即波态被限定在有限区域，稳定后形成驻波，本征值离散，能量被量子化；

势垒模型的透射系数为 $e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$ ，当入射粒子波的波长与势垒宽度相当或大于势垒宽度时，隧道效应比较明显，这是粒子**波动性**的体现；

非简并定态微扰：微扰后的定态薛定谔方程为： $(\hat{H}_0 + \hat{H}')\psi = E\psi$ ，可得二级近似解能量

$$\text{解 } E_k = E_k^{(0)} + H'_{kk} + \sum_n \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}, \text{ 一级近似波函数解 } \psi_k = \psi_k^{(0)} + \sum_n \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \psi_n^{(0)},$$

适用的条件为能级间距 $|E_k^{(0)} - E_n^{(0)}|$ 足够大，即 $\left| \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} \right| \ll 1$ ；

简并定态微扰的本质是简并态的线性组合；

三种统计分布：

麦克斯韦-玻尔兹曼分布：经典统计，粒子可区分，不受泡利原理限制；

玻色-爱因斯坦分布：粒子不可区分（全同性），不受泡利原理限制；

费米-狄拉克分布：粒子不可区分（全同性），受泡利原理限制（不相容性）；

宏观上表现为波动性，微观上能显现出粒子特性的粒子称为**玻色子**，例如**光子和声子**，服从

玻色-爱因斯坦分布 $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1}$ ；宏观上表现为粒子性，微观上能显现出波动特性的粒

子称为**费米子**，例如**电子**，服从**费米-狄拉克分布** $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} - 1}$ ；

费米等级：绝对零度时电子刚好填满的能级；

第二章 晶体中原子的状态

晶体：原子序列中存在有序排列结构的固体；

基元：相同周期排列的原子或原子团；

格点：代表基元的周期排列的点；

晶格（点阵）：格点的有序排列结构；

（固体物理学原胞）**原胞**：晶格中的最小重复单元，只含有一个格点；

（结晶学原胞）**晶胞**：最能充分反应晶格对称性的单元；

晶格常数：晶胞的边长，基矢长度；

晶列：连接格点的相互平行等距的直线族；

晶向指数：表示晶列的方向，记作 $[l_1l_2l_3]$ 。对称的晶向可用一**等效晶向**表示，记作 $\langle l_1l_2l_3 \rangle$ ；

晶面：其上格点分布相同的平行平面；

晶面指数：表示晶面的方向与面间距，记作 $(h_1h_2h_3)$ 。对称的晶面可用一**等效晶面**表示，记作 $\{h_1h_2h_3\}$ ；

密勒指数：晶胞坐标系中的晶面指数，记作 (hkl) ；

维-塞原胞：某个格点与其所有相邻格点用线段连接，其垂直平分面所围成的最小空间；

原胞体积=晶胞体积/晶胞中的格点数；

原胞体积*倒原胞体积 $=(2\pi)^3$ ；

第一布里渊区即为倒维-塞原胞，各布里渊区体积与倒原胞体积相同；

离子键构成的晶体：**CsCl** 晶体的晶胞由**简立方晶格**平移套构而成，**NaCl** 晶体的晶胞由**面心立方晶格**平移套构而成；

共价键构成的晶体：**金刚石**，**晶体硅**，**ZnS** 晶体的晶胞由**面心立方晶格**平移套构而成；

晶格结构及参数比较表：

	晶格常数/ 晶胞边长	晶胞数 之比	原胞数 之比	原子数 之比	原胞体 积	倒晶格及 其晶格常 数	第一布里 渊区形状	第一布里 渊区/倒 原胞体积	第一布里 渊区/倒 原胞体积 之比
简立方 晶格	a	1	1	1	a^3	$2\pi/a$ 简立方	立方体	$8\pi^3/a^3$	1
体心立方 晶格	a	1	2	2	$a^3/2$	$4\pi/a$ 面心立方	菱形十二 面体	$16\pi^3/a^3$	2
面心立方 晶格	a	1	4	4	$a^3/4$	$4\pi/a$ 体心立方	截角八面 体/十四面 体	$32\pi^3/a^3$	4

晶体原子的振动

绝热近似（不考虑电子受到激发跃迁到激发态所带来的影响）；

最近邻近似（每个原子只受到最近邻原子的作用，不考虑其他原子的影响）；

简谐近似（因原子在平衡位置附近做微小振动，可以看作是线性回复力作用下的简谐运动）。

晶格振动的集体行为可看作一行波在晶格中传播，称为**格波**。

设同种相邻原子间距为 a ，原子间作用力 $F = -\frac{dU}{dr}\big|_{r=a} (=0) - \frac{d^2U}{dr^2}\big|_{r=a} \Delta r = -\beta \Delta r$ ， β 称

为回复力常数。离散的波矢 $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ ，则**一维单原子晶格**的色散关系为 $\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{1}{2} qa \right|$ ，

在周期性边界条件下: $q = \frac{2\pi}{Na}Z = \frac{2\pi}{L}Z$, Z 为整数。当 $q = \pm \frac{2\pi}{a}$ 时, $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$, 当

$q = 0$ 时, $\omega_{\min} = 0$ 。长波近似下 ($q \rightarrow 0$), $\omega = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}|q|$, 极限长波速度 $v = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ 。周期

对称性: $\omega(q) = \omega(-q)$, $\omega(q) = \omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right)$ 。

一维双原子晶格的色散关系为: $\omega^2 = \frac{\beta}{\mu} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\mu}{m+M} \sin^2 aq} \right]$, $\mu = \frac{mM}{m+M}$, 在周期

性边界条件下: $q = \frac{\pi}{Na}Z$, Z 为整数。频率较低的格波为声学波, 当 $q = \pm \frac{2\pi}{a}$ 时,

$\omega_{\max} = \sqrt{\frac{2\beta}{M}}$, 当 $q = 0$ 时, $\omega_{\min} = 0$, 长声学波近似下 ($q \rightarrow 0$), $\omega_- = a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}|q|$,

极限长声学波速度 $v = a\sqrt{\frac{2\beta}{m+M}}$ 。频率较高的格波为光学波, 当 $q = 0$ 时, $\omega_{+\max} = \sqrt{\frac{2\beta}{\mu}}$,

当 $q = \pm \frac{2\pi}{a}$ 时, $\omega_{+\min} = \sqrt{\frac{2\beta}{m}}$, 长光学波近似下 ($q \rightarrow 0$), $\omega_+ = \sqrt{\frac{2\beta(m+M)}{mM}}$ 。周期对

称性: $\omega(q) = \omega(-q)$, $\omega(q) = \omega\left(q + \frac{\pi}{a}\right)$ 。

长声学波描述了原胞质心的振动, 长光学波描述了原胞中的原子相对于原胞质心的相对振动。故单原子晶格的振动格波只有声学支, 没有光学支。

格波支数等于原胞自由度数, 格波个数等于晶体自由度数, 声学波支数等于晶体维度。

若一维单原子晶格中有 N 个原胞, 则共有 1 支格波, N 个格波, 即有 N 种振动模式;

若一维双原子晶格中有 N 个原胞, 则共有 2 支格波, $2N$ 个格波, 即有 $2N$ 种振动模式, 其中 1 支声学波, 1 支光学波, N 个声学支格波, N 个光学支格波。

若三维复式晶格中有 N 个原胞, 每个原胞中有 l 个原子, 则共有 $3l$ 支格波, $3Nl$ 个格波, 即有 $3Nl$ 种振动模式, 其中 3 支声学波, $3(l-1)$ 支光学波, $3N$ 个声学波, $3N(l-1)$ 个光学波。

晶格振动的能量是量子化的, 声子是晶格振动能量的增减单位, 即晶格振动能量的增减必须是 $\hbar\omega_j(q)$ 的整数倍。一个格波, 也就是一种振动模式, 也称为一种声子。声子是玻色子,

即不可区分、不受泡利原理的限制。当温度变化时, 系统中的总声子数也将发生变化。

声子气的统计分布: 振动模式密度 $\rho(\omega) = \frac{dF}{dV_q} \frac{dV_q}{dq} \frac{dq}{d\omega} = \begin{cases} \frac{L}{2\pi} 2 \frac{dq}{d\omega} \text{ (一维)} \\ \frac{2S}{(2\pi)^2} 2\pi q \frac{dq}{d\omega} \text{ (二维)} \\ \frac{3V}{(2\pi)^3} 4\pi^2 q \frac{dq}{d\omega} \text{ (三维)} \end{cases}$, 声子

$$\text{气的总能量 } E = \int_0^\infty \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \rho(\omega) d\omega, \text{ 晶格热容 } C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \int_0^\infty k \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^2} \rho(\omega) d\omega.$$

声子气的统计性质:

以 N 个原胞构成的三维复式晶格为例:

经典模型: $C_V = 3Nk$;

爱因斯坦模型: 所有原子都近似以相同频率 ω_E 振动, 将色散关系简化为一条平直线, 即所

有声子都具有相同的能量 $\hbar\omega_E$, 得到爱因斯坦温度 $T_E = \frac{\hbar\omega_E}{k}$ 。该模型在常温和高温时很适

用, 但在低温时, $C_V \approx 3Nk \left(\frac{T_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_E}{T}}$, 热容以**指数**形式趋近于 0, 这与实际情况不符。

因为在**低温下**, 晶格振动激发多为频率低的**长声学波声子**, 此时色散关系应为线性的斜线。因爱因斯坦模型没有考虑声学波对热容的贡献, 故在低温时不再适用;

德拜模型: 按照低温激发的**长声学波声子**来近似处理色散关系, 即 $\omega = qv$, 得到模式密度

$$\rho(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2 d\omega, \text{ 德拜频率 } \omega_D = v \left(6\pi^2 \frac{3Nl}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \text{ 德拜温度 } T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k}。 \text{ 德拜模型只}$$

近似考虑了**长声学波**对热容的贡献。在低温时, $C_V \approx \frac{12\pi^4}{5} Nk \left(\frac{T}{T_D} \right)^3$, 热容以**立方**形式趋

近于 0, 与实际情况相符。

固体靠**声子**和**电子**导热, 绝缘体的热传导主要依靠**声子**的运动来完成, 导体的热传导主要依靠**电子**的运动来完成。简谐近似时声子之间无相互作用, 热导率为 0, 故应考虑**非简谐近似**来处理热导问题, 倒逆过程 (U 过程) 对热阻有贡献。

第三章 晶体中的大量电子

绝热近似 (原子核是相对静止不动的, 原子核之间的势能是常数);

单电子近似 (电子气中的每个电子都在相同的统计平均势场下运动, 用平均场近似代替电子间的相互作用);

周期势场近似 (把某个周期势场作为平均势场的主体, 把所有偏离周期场的小势场起伏作为微扰, 忽略电子之间的相互作用, 将多电子问题简化为单电子问题, 每个单电子都在周期性势场中运动)。

布洛赫定理: $\psi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r)$, $u_k(r + R_l) = u_k(r)$, $u_k(r)$ 为周期函数, 反映了周期势场对电子的影响。

自由电子气: 电子能量 $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2n\pi}{L} \right)^2$, 零级近似为三维无限深势阱, $\Delta V = 0$ 。

能态密度（单位能量间隔内的电子状态数） $g(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{dZ}{dV_k} \frac{dV_k}{dk} \frac{dk}{dE}$ ，且 $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ，

$$\text{计算得: } g(E) = \begin{cases} \frac{L}{\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} E^{-\frac{1}{2}} (\text{一维}) \\ \frac{S}{2\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{2}} E^0 (\text{二维}) \\ \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} (\text{三维}) \end{cases}, \text{ 费米能级 } E_F^0(T=0) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi N}{2L} \right)^2 (\text{一维}) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi N}{S} \right)^1 (\text{二维}) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} (\text{三维}) \end{cases}$$

$$\text{电子平均能量 } \bar{E}(T=0) = \begin{cases} \frac{1}{3} E_F^0 (\text{一维}) \\ \frac{1}{2} E_F^0 (\text{二维}) \\ \frac{3}{5} E_F^0 (\text{三维}) \end{cases}. \text{ 电子服从费米-狄拉克分布 } f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1},$$

电子气总能量 $E = \int_0^\infty f(E)g(E)EdE$ ，电子总数 $N = \int_0^\infty f(E)g(E)dE$ ；

电子气热容 $C_V = \frac{\pi^2}{2} Nk \left(\frac{kT}{E_F^0} \right)$ ，低温金属的总热容等于电子气热容与晶格热容之和。

近自由电子：将平均势能 V_0 作为零级近似，将势场的微小起伏 ΔV 视为微扰， ΔV 很小。

$$V(x) = V_0 + \Delta V = \frac{1}{L} \int_0^L V(x)dx + \sum_n V_n e^{i\frac{2\pi n}{a}x} = \frac{1}{L} \int_0^L V(x)dx + \sum_n \frac{1}{L} \int_0^L V(x) e^{-i\frac{2\pi n}{a}x} dx \cdot e^{i\frac{2\pi n}{a}x}$$

$$\psi_k(x) = \psi_k^{(0)} + \psi_k^{(1)}(x) = \psi_k^{(0)} + \sum_{k'} \frac{H'_{kk'}}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \cdot \psi_{k'}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} + \sum_{k'} \frac{V_n \delta_{k,k'-\frac{2\pi n}{a}}}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik'x}$$

波函数为波矢为 k 的前进平面波和该平面波收到周期场作用而产生的散射波之和，且满足

$$\text{布洛赫定理. } E_k \approx E_k^{(0)} + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sum_n \frac{|V_n|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}, \text{ 因 } H'_{kk'} = \begin{cases} V_n, k' - k = \frac{2\pi n}{a} \\ 0, k' - k \neq \frac{2\pi n}{a} \end{cases}$$

当 $-k$ 和 k 相差是倒格矢时，非兼并微扰不适用。运用兼并微扰可得到禁带宽度为 $2|V_n|$ 。

布里渊区的边界面不一定是能量的不连续面，二维三维晶体的能带可能产生交叠。

紧束缚电子：将第 m 个原子的势场作为零级近似，将其他原子的势场影响视为微扰， ΔV 很大。得到能带的能量形式为： $E(k) = E_i - J_0 - \sum_{\vec{R}_s \neq \text{near}} J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$ 。s 态电子的能带：简立方晶体：

$E(k) = E_0 - A - 2J(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$ ，允带宽度为 $12J$ ；体心立方晶

体: $E(k) = E_0 - A - 8J \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right)$, 允带宽度为 $16J$; 面心立方晶体:

$$E(k) = E_0 - A - 4J \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2} \cos \frac{k_x a}{2} \right), \text{ 允带宽度为}$$

$8J$ 。带宽决定于 J , 即相邻电子云的交叠程度, 电子公有化运动的强弱。

将电子看作准经典粒子的条件: $\Delta x \gg a$, $\Delta k \ll \frac{2\pi}{a}$ 。

电子的平均速度 $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$, 有效质量 (概括了晶格对电子的作用) $m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E(k) / dk^2}$;

在能带底部 $k=0$ 附近, m^* 为正值, 且能带越弯曲, m^* 越小;

在能带顶部 $k = \frac{2\pi}{a}$ 附近, m^* 为负值, 且能带越弯曲, m^* 越小。

能带的填充与导电性

满带电子不导电, 不满带电子在外场作用下可导电。

金属或导体的能带中一定有**不满带**, 价带是满带, 导带是半满带, 费米能级在导带中;

绝缘体中的能带只有**满带和空带**, 价带是满带, 导带是空带, 禁带很宽, 费米能级在禁带中央;

半导体和绝缘体相似, 能带中只有**满带和空带**, 但禁带较窄, 费米能级仍在禁带中央。

各能带示意如下图所示:

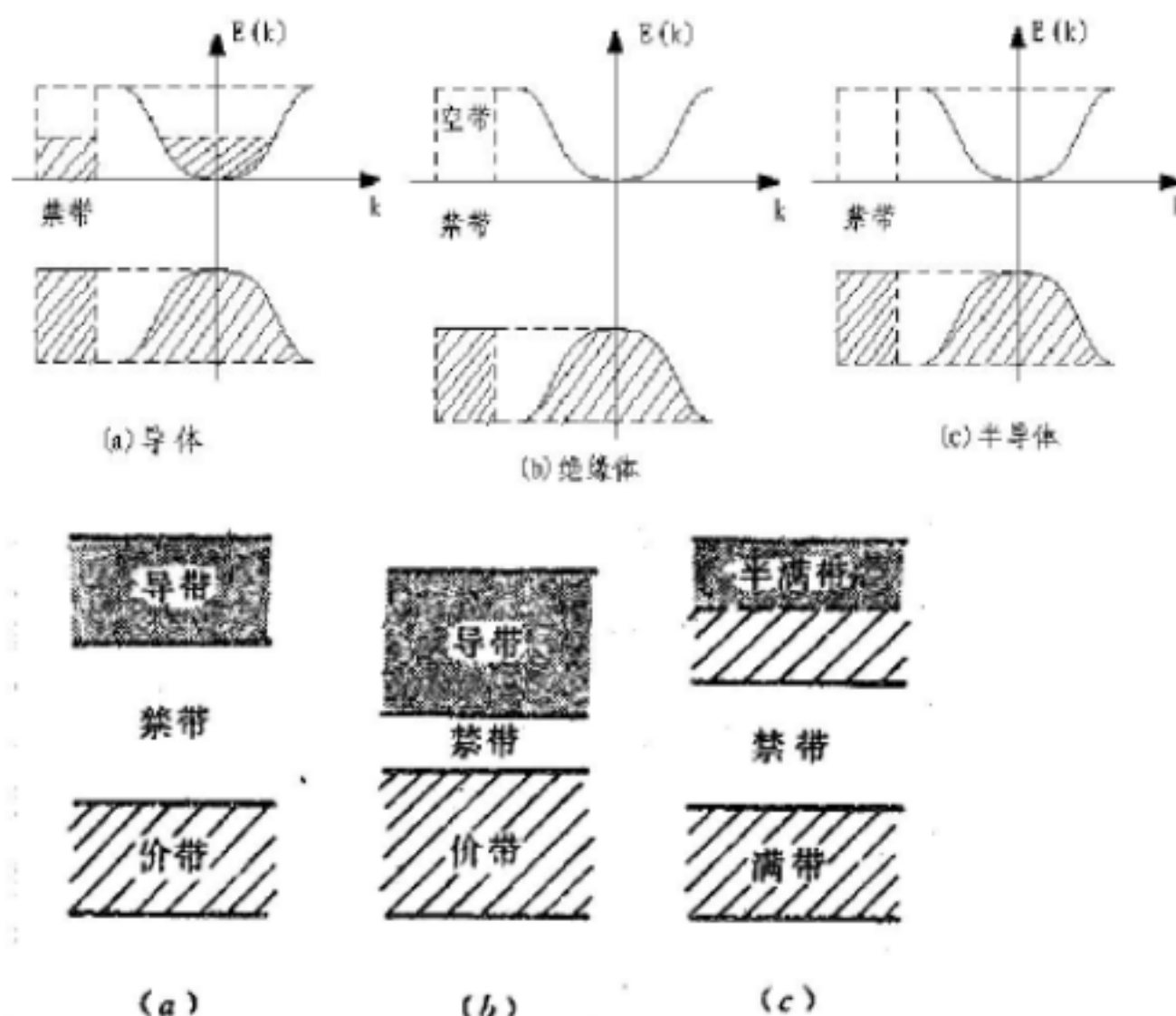


图 1-12 绝缘体、半导体和导体的能带示意图

(a) 绝缘体; (b) 半导体; (c) 导体。

《固体物理基础》知识总结完。