

复习提纲

1. 声子：晶格振动的能量量子。一个格波是一种振动模，能量为 $\hbar\omega_q$ ，反映晶格原子集体运动状态的激发单元，称为声子。
2. 空穴：自己找
3. 格波：晶格具有周期性，晶格的振动模具有波的形式，称为格波。
4. 费米面：在每一个部分占据的能带中， k 空间都有一个占有电子与不占有电子区域的分界面，这些表面的集合就是费米面。
5. 布里渊区：自己找
6. 固体按照材料和原子排列的规则程度来划分可以分为：晶体；非晶体；准晶体
7. 晶体结构的最显著的特点是它的周期性；
8. 反映晶格的周期性的最小重复单元称为原胞；为了反映其对称性也常选取晶胞作为最小的重复单元。
9. 简单立方晶胞包含的原子数为1个；面心立方晶胞包含的原子数为4个；体心立方晶胞包含的原子数为2个；
10. 晶体结合的类型可以分为离子结合；共价结合；金属结合；范德瓦耳斯结合；
11. 晶体的宏观对称性共有32种；以这些对称性为特征，可分出7大晶系；
 1. 简单立方格子第一布里渊区为原点和6个近邻格点的垂直平分面围成的立方体，体心立方格子是截角立方体。
 2. 晶体特点主要有周期性，对称性，各向异性。
 3. 每个粒子都是在空间重复排列的最小单元，称为晶胞。
 4. 设面心立方晶格的晶格常数为 a ，则其 $\{100\}$ 面的面间距为 $\frac{a}{2}$ 。
 5. 金属性结合的基本特点是无方向性。
 6. 固体热容量的经典统计规律是杜隆-珀蒂定律。
 7. 固体热容主要有两部分贡献，一部分来源于晶格振动，另一部分来源于电子运动。
 8. 固体的结合方式主要有离子键，共价键，金属键，范德瓦耳斯键。
 9. 把分散的原子结合成晶体，在这个过程中所释放出来的能量称为结合能。
 10. 共价结合有两个基本特征：方向性和饱和性。
 11. 标志原子得失电子能力的物理量称为原子的电负性。
 12. 原子失去一个电子所必需的能量称为原子的电离能，可以用来表征金属性。
 13. 由简正坐标所代表的，体系中所有原子一起参与的共同振动，称为一个简正模。
14. 晶格的振动模具有波的形式，称为格波。
15. 格波的能量量子称为声子，它的能量等于 $\hbar\omega_q$ 。

16. 一个晶格中最小重复单元，称为_____.
17. 物质按照固体的材料和原子排列的规则程度可分为：_____, _____, _____.
18. _____被用来标记晶面系.
19. 倒格子的基矢方向就是正格子中某一组晶面的_____.
20. 倒易点阵的一个基矢是与正点阵的_____相对应的.
21. 晶体有七大晶系，_____种布拉伐格子，_____种点群.
22. 反映晶格的周期性的最小重复单元称为_____；为了反映其对称性也常选取_____作为最小的重复单元.
23. 简单立方晶胞包含的原子数为_____；面心立方晶胞包含的原子数为_____；体心立方晶胞包含的原子数为_____.
24. 布拉菲格子的格点可以看作是分列在平行等间距的平面系上，这种平面称为_____.
25. 每个格点周围情况完全相同的格子称为_____.
26. 倒易点阵的一个基矢是与正点阵的_____相对应的.
27. 范德瓦耳斯结合的基本特征是_____.
28. _____叫声子.
29. 能带理论是_____；其中的三个基本假设是_____；_____；_____.
30. _____是确定晶格振动谱的最重要的实验方法.
31. 确定晶格振动谱的实验方法主要有_____；_____；_____.
32. 晶格热容量量子理论的两个主要模型是_____和_____.
33. 最高的满带称为_____，最低的空带称为_____.
34. 在每一格占据的能带中， k 空间都有一个占有电子与不占有电子区域的分界面，所有这些面的集合称为_____.
35. 晶体中电子准经典运动的两个基本关系式为_____和_____.
36. 立方晶体有_____条二重旋转对称轴，_____条三重旋转对称轴.
37. 体心立方的倒格子是_____，面心立方的倒格子是_____.
38. 设面心立方的晶格常数为 a ，则其 $\{100\}$ 面的面间距为_____， $\{110\}$ 面的面间距为_____.
39. 有效质量和电子质量可以有很大的差别，原因是有效质量包含了_____的作用.
40. 回旋共振试验主要是用来测定半导体材料的_____.
41. 在恒定电场作用下电子在 k 空间做_____.
42. 在恒定电场作用下电子在实空间做_____.
43. 在恒定磁场作用下电子在 k 空间做_____.

44. 在恒定磁场作用下电子在实空间做_____.

45. 德拜模型和爱因斯坦模型的主要区别在于其考虑到了_____.

答案:

1. 立方体; 正十二面体; 2. 长程有序性; 周期性; 各向异性; 3. 基元; 4. a ; 5. 电子的共有化

6. 自己找; 7. 晶格热容; 电子热容 8. 离子结合; 共价结合; 金属性结合; 范德瓦耳斯结合

9. 结合能; 10. 方向性; 饱和性; 11. 负电性; 12. 电离能; 原子对价电子束缚的强弱; 13. 振动模; 14. 格波; 15. 声子; 16. 原胞; 17. 晶体; 非晶体; 准晶体; 18. 密勒指数; 19.

法线方向; 20. 一组晶面; 21. 14; 7; 32; 22. 原胞; 晶胞; 23. 1; 4; 2; 24. 晶面

25. 布喇菲格子; 26. 一组晶面; 27. 保持原来的电子结构; 28. 晶格振动的能量量子; 29. 单电子近似的理论; 绝热近似; 单电子近似; 周期势场近似; 30. 中子的非弹性散射; 31. 中子的非弹性散射; X射线衍射; 光子与晶格的非弹性散射; 32. 爱因斯坦模型; 德拜模型; 33. 价带; 导带

34. 费米面; 35. 自己找; 36. 6; 4; 37. 面心立方; 体心立方; 38. a ; 39. 周期场

40. 有效质量; 41. 循环运动; 42. 振荡运动; 43. 圆周运动; 44. 螺旋运动; 45. 频率分布

分布

简答题:

1. 简述 Bloch 定理?

答案自己找

答案自己找

2. 爱因斯坦模型在低温下与实验存在偏差的根源是什么?

答: 按照爱因斯坦温度的定义, 爱因斯坦模型的格波的频率主要属于光学支频率. 但光学格波在低温时对热容的贡献非常小, 低温下对热容贡献大的主要是长声学格波. 也就是说爱因斯坦没考虑声学波对热容的贡献是爱因斯坦模型在低温下与实验存在偏差的根源.

3. 固体能带论的基本思路是怎样的?

答: 用绝热近似和单电子近似, 把原子实及其它电子的影响用等效的周期势场 来表示, 进而求解 S 一方程, 并用量子力学的微扰论求出固体中电子的波函数和能量. 关键是等效的周期势场 该如何表示.

4. 长光学支格波与长声学支格波本质上有何差别?

答: 长光学支格波的特征是每个原胞内的不同原子做相对振动, 振动频率较高, 它包含了晶格振动频率最高的振动模式. 长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移, 原胞做整体运动, 振动频率较低, 它包含了晶格振动频率最低的振动模式, 波速是一常数. 任何晶体都存在声学支格波, 但简单晶格(非复式格子)晶体不存在光学支格波.

5. 固体能带论的两个基本假设是什么?并简单描述。

1.答: (1)绝热近似, 原子实的影响用周期势场等效, 把多体问题化为多电子问题。

(2)单电子近似, 把其余电子对某一电子作用也用等效的平均势场表示, 把多电子问题简化为单电子问题。

6. 紧束缚模型下, 内层电子的能带与外层电子的能带相比较, 哪一个宽? 为什么?

答：带宽取决于 J_1 ，大小取决于近邻原子波函数之间的相互重叠，重叠越多，形成能带越宽。若原子间的距离越小，原子波函数间的交叠就越多；相互作用积分 J 也就越大，因而能带的宽度也就越宽。原子的内层电子轨道半径较小，所形成的能带较窄；而外层电子的轨道半径较大，所形成的能带较宽。

判断（自己找答案）

1. 爱因斯坦模型在低温下与实验存在偏差的根源是由于主要考虑了声学波对热容的贡献。（ ）
2. 满带当中的电子在无外电场情况下不导电，但在有外电场存在的情况下可以导电。（ ）
3. 复式格子是必须由不同原子或离子构成的晶体，如 NaCl 、 CsCl 、 ZnS 等。（ ）
4. 长声学支格波的特征是原胞内的不同原子没有相对位移，原胞做整体运动。（ ）
5. 温度一定时，一个光学波的声音数目少于一个声学波的声音数目。（ ）

计算题

1. 设一维晶体的电子能带可以写成 $E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{7}{8} - \cos ka + \frac{1}{8} \cos 2ka \right)$

式中 a 为晶格常数。计算 1) 能带的宽度；2) 电子在波矢 k 的状态时的速度；

答：1) 能带的宽度 能带底部 $k=0, E(0)=0$ ；能带顶部 $k = \frac{\pi}{a}$ ， $E\left(\frac{\pi}{a}\right) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

能带宽度 $\Delta E = E\left(\frac{\pi}{a}\right) - E(0) = \frac{2\hbar^2}{ma^2}$

电子在波矢 k 的状态时的速度 $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$ $v(k) = \frac{\hbar}{ma} (\sin ka - \frac{1}{4} \sin 2ka)$

2. 计算简立方晶格中原子所占体积与总体积之比。

$$a = 2r, V = \frac{4}{3} \pi r^3, V_C = a^3, n = 1$$

$$\therefore \chi = \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{8r^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

3. 若格波的色散关系为 $\omega = cq^2$ ，求其二维的状态密度表达式。

$$|\nabla_q \omega(q)| = \frac{d\omega}{dq} = 2cq$$

$$g(\omega) = \frac{S}{(2\pi)^2} \frac{1}{2cq} 2\pi q = \frac{S}{4\pi c}$$