固体物理期末复习

晶体结构

常见晶体：

面心立方晶体(FCC) [编辑]

面心立方晶体的素格子基矢可以写成下列三项

$$\boldsymbol{a_1} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$
$$\boldsymbol{a_2} = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$$
$$\boldsymbol{a_3} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

体心立方晶体(BCC) [编辑]

体心立方晶体的素格子基矢可以写成下列三项

$$\boldsymbol{a_1} = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$
$$\boldsymbol{a_2} = \frac{a}{2}(+\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$
$$\boldsymbol{a_3} = \frac{a}{2}(+\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

倒格矢：

三维晶格 [编辑]

对三维晶格而言，我们定义素晶胞的基矢 $(\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3})$，可以用下列公式决定倒晶格的晶胞基矢$(\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \boldsymbol{b_3})$

$$\boldsymbol{b_1} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})}$$
$$\boldsymbol{b_2} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_3} \times \boldsymbol{a_1}}{\boldsymbol{a_2} \cdot (\boldsymbol{a_3} \times \boldsymbol{a_1})}$$
$$\boldsymbol{b_3} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a_2}}{\boldsymbol{a_3} \cdot (\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a_2})}$$

间距和体积：

倒晶格与正晶格的基矢满足以下关系

$$\boldsymbol{a_i} \cdot \boldsymbol{b_j} = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

定义三维中的倒晶格向量**G**

$$\mathbf{G} = h\boldsymbol{b_1} + k\boldsymbol{b_2} + l\boldsymbol{b_3}$$

其中hkl为密勒指数，向量**G**的模长与正晶格的晶面间距有以下关系

$$|\mathbf{G_{hkl}}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

向量**G**和正晶格向量**R**有以下关系

$$\mathbf{R} = c_1\boldsymbol{a_1} + c_2\boldsymbol{a_2} + c_3\boldsymbol{a_3}$$
$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$$

三维倒晶格中的晶胞体积Ω_G和正晶格的晶胞体积Ω有以下关系

$$\Omega_G = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

布洛赫波的关系：

在此以一维晶格为例。在一个以$\boldsymbol{a}$为基矢的一维晶格中，其波函数应该为布洛赫波

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$$

也是一个布洛赫波包。则波函数有以下性质

$$\begin{aligned} \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{x}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{x}} u_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{x}) \\ &= \psi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{x}) \end{aligned}$$

可见，倒晶格向量**G**描述了波函数在以**k**为基矢的动量空间（k空间）内的周期性。其向量单位，即倒晶格的基矢$\boldsymbol{b_i}$是描述k空间中平移对称性的基矢。其最小可重复单位，即倒晶格的晶胞，称为第一布里渊区。由于波矢**k**和动量与波函数对应的能量密切相关，在能带理论中也用来解释能带的周期性。

三维晶格振动

声子

3.4.3 格波能量量子-声子

$$\varepsilon_{q,s}=(n_{q,s}+\frac{1}{2})\hbar\omega_s(\boldsymbol{q})$$

某个波矢为$\boldsymbol{q}$，频率为$\omega_s(\boldsymbol{q})$的简正模(格波)的能量量子$\hbar\omega_s(\boldsymbol{q})$ → 波矢为$\boldsymbol{q}$，频率为$\omega_s(\boldsymbol{q})$的声子

3nN个简正模，等价于3nN个格波 → 3nN种声子（3nN种声子的状态）

某个波矢为$\boldsymbol{q}$，频率为$\omega_s(\boldsymbol{q})$的简正模处于量子数为$n_{q,s}$的状态态能量 → 波矢为$\boldsymbol{q}$，频率为$\omega_s(\boldsymbol{q})$的模式上占据（布居）了$n_{q,s}$个声子

声子是一种“准”粒子，是简正模（格波）的能量量子；声子具有能量，但没有真实动量，只有“准”动量；它只存在于晶体内部；在平衡态下每一种声子的平均声子数只是温度的函数；在简谐近似（低激发态）下，声子之间没有相互作用。

相速度与群速度

> **相速度**可以认为是相位变化的传播**速度**，也即我们平时理解的波速。 而**群速度**是振幅变化的传播**速度**，振幅的空间分布形成波包，所以就是波包的传播**速度**。

声子态密度与比热容

一个能量子处于特定能级的能量：

$$E_q=(n_q+\frac{1}{2})\hbar\omega(q)$$

处于某个能级的概率按照玻色分布

$$P_{n_j}=Ce^{-E_j/k_BT}$$

一个具有确定频率的声子平均能量：

振动模的平均能量 $\bar{E}_j = \sum_{n_j} P_{n_j} E_j$

经过计算得到：

一个振动模的平均能量 $\bar{E}_j(T) = \frac{1}{2}\hbar\omega_j + \frac{\hbar\omega_j}{e^{\hbar\omega_j/k_BT} - 1}$

众多不同频率的声子加起来：

$$C_V = \sum_{j=1}^{3N} k_B \left(\frac{\hbar\omega_j}{k_BT}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_j/k_BT}}{(e^{\hbar\omega_j/k_BT} - 1)^2}$$

但是我们总不可能逐个数出3N个声子，因此继续计算，首先我们得到色散关系：

色散关系

$\omega = C_l q$ *For Lognitudinal Wave*

$\omega = C_t q$ *For Transverse Wave*

一定q区间内的振动数目：

振动数目 $\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq$

总的热容化为积分形式：

晶体总的热容 $C_V = \int_0^{\omega_m} k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_BT}}{(e^{\hbar\omega/k_BT} - 1)^2} g(\omega) d\omega$

—— 振动频率分布函数 $g(\omega)$ 和 ω_m 的计算

现在我们需要的是频率上限以及态密度的具体形式，首先来求态密度g

一定q区间中的振动数目已知；omiga跟q的关系也有了（色散关系），因此可以求出一定omiga中的振动数目（也就是态密度），这里要分横波纵波计算。

波矢的数值在 $q \to q+dq$ 之间的振动方式的数目

$$\frac{V}{(2\pi)^3}4\pi q^2 dq \qquad q=\frac{\omega}{C_l} \qquad dq=\frac{d\omega}{C_l}$$

频率在 $\omega \to \omega+d\omega$ 之间，纵波数目 $\frac{V}{2\pi^2 C_l^3}\omega^2 d\omega$

频率在 $\omega \to \omega+d\omega$之间，横波数目 $2\times\frac{V}{2\pi^2 C_t^3}\omega^2 d\omega$

频率在 $\omega \to \omega+d\omega$之间，格波数目 $(\frac{1}{C_l^3}+\frac{2}{C_t^3})\frac{V}{2\pi^2}\omega^2 d\omega$

$$g(\omega)=\frac{3V}{2\pi^2\overline{C}^3}\omega^2 \qquad \frac{3}{\overline{C}^3}=\frac{1}{C_l^3}+\frac{2}{C_t^3}$$

至此，原则上所有的物理问题已经解决，所有的量都能被算出或者测出，剩下只是数学问题。

X射线衍射

原子散射因子：

$\rho(\vec{r})$ 为电子分布函数(概率密度)， 在P点附近体积元$\mathrm{d}\tau$内的电子个数为：$\rho(\vec{r})\mathrm{d}\tau$ 。

这 $\rho(\vec{r})\mathrm{d}\tau$个电子在观测点产生的振幅就是：

$$A_e e^{i\Delta\varphi}\rho(r)\mathrm{d}\tau$$

原子中所有电子引起的散射波在观察点的总振幅为：

$$A_a=\iiint A_e\rho(\vec{r})e^{i2\pi\frac{\vec{s}\cdot\vec{r}}{\lambda}}\mathrm{d}\tau$$

原子散射因子：

$$\boxed{f_{(s)}=\frac{A_a}{A_e}=\iiint\rho(\vec{r})e^{i2\pi\frac{\vec{s}\cdot\vec{r}}{\lambda}}\mathrm{d}\tau}$$

在所考虑方向上，几何结构因子为

$$\boxed{F_{(s)} = \sum_j f_j e^{i\frac{2\pi}{\lambda}\vec{s}\cdot\vec{R}_j}}$$

作业题上的计算公式：

据此，在所考虑的方向上，几何结构因子可表示为：

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{i2\pi n(hu_j+kv_j+lw_j)}$$

作业题：

解：AB$_3$的立方单胞中含有1个A原子，三个B原子.

取：$A:(0,0,0)\quad B:(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0),(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}),(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

$$F_{hkl} = \sum_i f_i e^{-2\pi i(hx_{i1}+kx_{i2}+lx_{i3})}$$

$$= f_A + f_B[e^{-\pi i(h+k)} + e^{-\pi i(h+l)} + e^{-\pi i(k+l)}]$$

(b) $F_{hkl} = f_A + f_B[e^{-\pi i(h+k)} + e^{-\pi i(h+l)} + e^{-\pi i(k+l)}]$

$$I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2 = \begin{cases} |f_A+3f_B|^2 & \text{当}h,k,l\text{为全奇或全偶时} \\ |f_A-f_B|^2 & \text{其他情况下} \end{cases}$$

(c) 若 $f_A = f_B$ 当h,k,l部分为奇，部分为偶时消光

（100），（010），（001），（110），（210）等

能带论：

1. 解：(a) $\because \psi_k(x+a) = \psi_k(x)\, e^{i\vec{k}\cdot a}$

$\therefore \psi_k(x+a) = \sin\frac{\pi(x+a)}{a} = -\sin\frac{\pi x}{a} = e^{i\vec{k}\cdot a}\sin\frac{\pi x}{a}$

$\therefore e^{i\vec{k}\cdot a} = -1$

$\therefore |\vec{k}| = \pm\left(\frac{\pi}{a} + \frac{2n\pi}{a}\right)$

(b) $\because \psi_k(x+a) = i\cos\frac{3\pi(x+a)}{a} = -i\cos\frac{3\pi}{a} = i\cos\frac{3\pi}{a}\cdot e^{i}$

$\therefore e^{i\vec{k}\cdot a} = -1$

$\therefore |\vec{k}| = \pm\left(\frac{\pi}{a} + \frac{2n\pi}{a}\right)$, $n = 0, 1, \cdots n$

(c) $\because \psi_k(x+a) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x+a-la) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x-la)$

$= e^{i\vec{k}\cdot a}\sum_{l=-\infty}^{\infty} f(x-la)$

$\therefore e^{i\vec{k}\cdot a} = 1$

$\therefore |\vec{k}| = \pm\frac{2n\pi}{a}$, $n = 0, 1, \cdots n$

一维周期场中电子的波函数满足Bloch定理，若晶格常数为a的电子波函数为：

$(a)\psi_k(x) = sin\frac{\pi x}{a}$

$(b)\psi_k(x) = i\,cos\frac{3\pi x}{a}$

$(c)\psi_k(x) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} f(x-la)$

其中f为某确定的函数，试求电子在这些态的波矢。

近自由电子

周期性势场： $U(x) = U(x+a)$　　a为晶格常数

作Fourier展开： $U(x) = U_0 + \sum_{n\neq 0} U_n \exp\left(i\frac{2\pi nx}{a}\right)$

其中　$U_0 = \frac{1}{L}\int_0^L U(x)dx$　—— 势能平均值 $\overline{U}$ 视为常数

$$U_n = \frac{1}{L}\int_0^L U(x)\exp\left(-i\frac{2\pi nx}{a}\right)dx$$

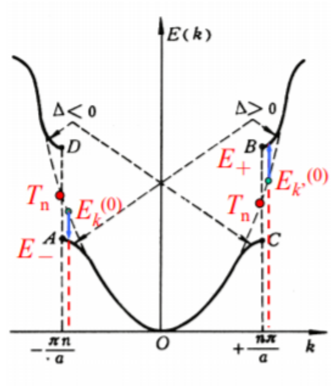
$$E_{+}=T_{n}+\left|U_{n}\right|+\Delta^{2}T_{n}\left(\frac{2T_n}{\left|U_n\right|}+1\right)$$

$$E_{-}=T_{n}-\left|U_{n}\right|-\Delta^{2}T_{n}\left(\frac{2T_n}{\left|U_n\right|}-1\right)$$

从以上的分析说明，**由于周期场的微扰，E(k)函数将在布里渊区边界 $k=\pm n\pi/a$ 处出现不连续，能量的突变为**

$$E_g=E_{+}-E_{-}=2\left|U_n\right|$$

这个能量突变称为能隙，即禁带宽度，这是周期场作用的结果。而在**离布里渊区边界较远处，电子的能量近似等于自由电子的能量，且是 k 的连续函数**，这时周期场对电子运动的影响很小，电子的运动性质与自由电子基本相同。



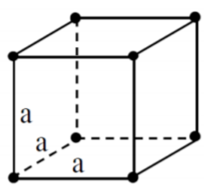
紧束缚

$$E(\boldsymbol{k})=\varepsilon_i-J_0-\sum_{\boldsymbol{R}_s=\text{近邻}}J(\boldsymbol{R}_s)\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_s)$$

例2　求简单立方晶体中由电子的 s 态所形成的能带

由于 s 态的原子波函数是球对称的，沿各个方向的重叠积分相同。因此，对于不同方向的近邻，有相同的值：

$J(\boldsymbol{R}_s)=J_1$　　$\boldsymbol{R}_s=$近邻格矢



对于简单立方：

$\boldsymbol{R}_s$＝(±a, 0, 0), (0, ±a, 0), (0, 0, ±a)

$$\therefore E(\boldsymbol{k})=\varepsilon_s-J_0-J_1\left(e^{ik_xa}+e^{-ik_xa}+e^{ik_ya}+e^{-ik_ya}+e^{ik_za}+e^{-ik_za}\right)$$

$$=\varepsilon_s-J_0-2J_1\left(\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_za\right)$$

在简单立方晶格的简约区中

Γ点：**k**=(0, 0, 0)

$$E(\Gamma)=\varepsilon_s-J_0-6J_1$$

X点：**k**=(π/a, 0, 0)

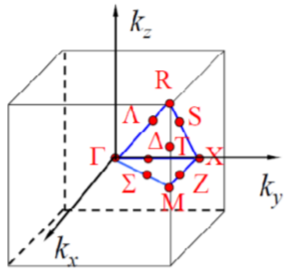
$$E(X)=\varepsilon_s-J_0-2J_1$$

R点：**k**=(π/a, π/a, π/a)

$$E(R)=\varepsilon_s-J_0+6J_1$$

M点：k= (π/a, π/a, 0)

$$E(M)=\varepsilon_s-J_0+2J_1$$



由于s态波函数是偶宇称，$\varphi_s(\boldsymbol{r})=\varphi_s(-\boldsymbol{r})$， 所以，在近邻重叠积分中波函数的贡献为正，即$J_1>0$。