固体物理知识点速记

牟一鹏

2023 年 7 月 6 日

1 晶体结构

晶体、晶体点阵（布拉维格子，空间格子，晶格）、格矢与格点、单胞、原胞、维格纳——赛兹原胞、简单立方（SC）、体心立方（BCC）、面心立方（FCC）、六方密堆（HCP）、各向异性、晶列、晶面、FCC 与 BCC 互为倒格子、第一布里渊区（FBZ）、布里渊区的特点

$$\text{晶向}:[l_1\ l_2\ l_3],\langle l_1\ l_2\ l_3\rangle \tag{1.1}$$

$$\text{密勒指数}:(h\ k\ l),\{h\ k\ l\} \tag{1.2}$$

$$\text{倒格子 (倒易点阵)}:\boldsymbol{G}_L\cdot\boldsymbol{R}_m=2\pi n \tag{1.3}$$

$$\text{倒格子基矢}:\boldsymbol{a}_i\cdot\boldsymbol{b}_j=2\pi\delta_{ij},\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi}{\Omega}\boldsymbol{a}_2\times\boldsymbol{a}_3,A\cdot B^T=2\pi I \tag{1.4}$$

$$\text{布里渊区的界面方程}:\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G}_L=\frac{1}{2}\boldsymbol{G}_L^2 \tag{1.5}$$

对称性、基本点对称操作、晶体中允许的旋转轴、晶体中点对称操作、三维晶体（32 种点群，32 种晶类，7 个晶系，14 种布拉维格子）、二维晶体（10 种点群，4 个晶系，5 种布拉维格子）、简单晶格、复式晶格、金刚石结构、准晶体、14 种 FBZ 及其形状、布里渊区界面方程的意义、X 射线与电子作用方式、

$$\text{布拉格定律}:2d_{hkl}\sin\theta=n\lambda \tag{1.6}$$

$$\text{劳厄衍射条件}:\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{G} \tag{1.7}$$

$$\text{原子散射因子}:f(\boldsymbol{q})=\int\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r},\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_0 \tag{1.8}$$

$$\text{几何结构因子}:F(\boldsymbol{G}),I(\boldsymbol{G})=\left|f_\alpha\exp\left[\mathrm{i}2m\pi\sum_{j=1}^{3}h_jx_j^\alpha\right]\right|^2 \tag{1.9}$$

2 晶体结合

结合能（内聚能）、离子键（无方向性）、马德隆常数 a、共价键（饱和性，方向性）、共价晶体的结合能、金属键（无方向性）、范德瓦尔斯相互作用、共价键与离子键 > 金属键 > 氢键 > 分子

间作用力、应变、杨氏模量 Y、切变模量 G

$$\text{离子相互作用}:U=N\left[-\frac{A}{r}+\frac{B}{r^n}\right] \tag{2.1}$$

$$\text{体弹性模量}:K=-V\frac{\partial p}{\partial V}=\frac{(n-1)aq^2}{4\pi\varepsilon_0\times 9\alpha r_0^4}(V/N=\alpha r_0^3) \tag{2.2}$$

$$\text{电离度}:f=\frac{1-\lambda^2}{1+\lambda^2} \tag{2.3}$$

$$\text{LJ 势}:U(r)=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \tag{2.4}$$

$$U_{\text{tot}}(r)=2N\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{12}-A_6\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{6}\right] \tag{2.5}$$

$$\text{弹性波传播速度}:v_{\parallel}=\sqrt{\frac{Y}{\rho}},v_{\perp}=\sqrt{\frac{G}{\rho}} \tag{2.6}$$

3 晶格振动

格波、截止频率、一维双原子链的 a（振幅不一样!!!）、声学支（整体运动，3 支）、光学支（相对运动，$3n-3$ 支）、波矢数 (N) 与模式数 $(3nN)$、范霍夫奇点、近似条件、简正坐标 Q_i 与简正振动、声子（准粒子）、元激发、晶格热容与电子热容、德拜频率 ω_D、爱因斯坦模型和德拜模型的局限性

$$\text{Dulong-Petit 定律}:C_V=3Nk_B \tag{3.1}$$

$$\text{回复力常数}:\beta=\left(\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}r^2}\right)_{\text{平衡位置}}(\beta>0) \tag{3.2}$$

$$\text{一维单原子链}:u_n=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-nak)},\omega^2=\frac{4\beta}{m}\sin^2\frac{ak}{2} \tag{3.3}$$

$$\text{一维单原子链的 FBZ}:-\frac{\pi}{a}<k<\frac{\pi}{a} \tag{3.4}$$

$$\text{周期性边界条件}:k=\frac{2\pi}{Na}n,-\frac{N}{2}\leqslant n<\frac{N}{2} \tag{3.5}$$

$$\text{一维双原子链 (注意 a!!!)}:u_{2n}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-2nak)},u_{2n+1}=B\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-(2n+1)ak)} \tag{3.6}$$

$$\omega_{\pm}^2=\frac{\beta(M+m)}{Mm}\left[1\pm\sqrt{1-\frac{4Mm}{(M+m)^2}\sin^2 ak}\right] \tag{3.7}$$

$$\text{三维态密度}:g(\omega)=\frac{V}{(2\pi)^3}\iint\frac{\mathrm{d}S_k}{|\nabla_k\omega(k)|} \tag{3.8}$$

$$\text{爱因斯坦模型}:C_V=3Nk_B\left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2\frac{\mathrm{e}^{\Theta_E/T}}{(\mathrm{e}^{\Theta_E/T}-1)^2},\Theta_E=\frac{\hbar\omega_E}{k_B} \tag{3.9}$$

$$\text{德拜模型}:g(\omega)=\frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2,\Theta_D=\frac{\hbar\omega_D}{k_B} \tag{3.10}$$

$$C_V=9Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3\int_0^{\frac{\Theta_D}{T}}\frac{x^4\mathrm{e}^x}{(\mathrm{e}^x-1)^2}\mathrm{d}x \tag{3.11}$$

非简谐效应、膨胀系数的线性性、正常过程与倒逆过程、格林艾森常数

$$\text{非谐势能}:u(a_0+\delta)=\frac{1}{2}\beta\delta^2+\frac{1}{6}g\delta^3+\frac{1}{24}h\delta^4, g<0, h>0 \tag{3.12}$$

$$\text{热导率}:\kappa=\frac{1}{3}C_V\lambda\bar{v}_s, \lambda\propto\frac{1}{\bar{n}}, \bar{n}=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1} \tag{3.13}$$

$$\text{高温与低温情况}:\kappa\propto\frac{1}{\bar{n}}\propto\frac{1}{T}, \kappa\propto C_V\propto T^3 \tag{3.14}$$

$$\text{格林艾森近似状态方程}:p=-\frac{\mathrm{d}U_l}{\mathrm{d}V}+\gamma\frac{\bar{E}}{V}, \gamma=-\frac{\mathrm{d}\ln\omega}{\mathrm{d}\ln V} \tag{3.15}$$

$$\text{格林艾森定律}:\alpha=\frac{\gamma C_V}{KV} \tag{3.16}$$

4 金属自由电子论

能带论的两种理解、Drude 模型、洛伦兹常数 L、能态密度、自由电子气的简并性、电导率的贡献、准经典近似、WF 定律适用范围、接触电势

$$\text{电子数密度}:n=N_A\frac{Z\rho}{A}(\text{摩尔质量注意单位换算}) \tag{4.1}$$

$$\text{WF 定律}:\frac{\kappa}{\sigma}=LT, L=\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2 \tag{4.2}$$

$$\text{自由电子的费米波矢}:k_F=(3\pi^2n)^{\frac{1}{3}} \tag{4.3}$$

$$\text{化学势与能量}:\mu=\mu_0\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\mu_0}\right)^2\right] \tag{4.4}$$

$$U=\frac{3}{5}N\mu_0\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\mu_0}\right)^2\right] \tag{4.5}$$

$$\text{极低温系统热容}:C=C_e+C_V=\gamma T+bT^3 \tag{4.6}$$

$$\text{极低温顺磁磁化率}:\chi_0=\frac{3n\mu_0\mu_B^2}{2E_F}(\mu_0\text{为真空磁导率}) \tag{4.7}$$

$$\text{电导率与热导率}:\sigma=\frac{ne^2\tau_F}{m}, \kappa_e=\frac{\pi^2nk_B^2T}{3m}\tau_F \tag{4.8}$$

5 能带论

BO 近似、平均场近似、周期场近似、单电子运动方程、Bloch 定理的意义、波矢量 $\boldsymbol{k}$ 的意义、简约波矢与广延波矢、每一个能带容纳的电子数 $2N$、简约布里渊区图像 $E_n(\boldsymbol{k})$、能带的交叠、

$$\text{Bloch 定理}:\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_l) \tag{5.1}$$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_l)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_l}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{5.2}$$

$$\text{能隙 (禁带宽度)}:E_g=2|U_n|, U_n=\frac{1}{L}\int_0^L U(x)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi nx}{a}\right)\mathrm{d}x \tag{5.3}$$

LCAO 能带宽度、能带的对称性 (平移，点群，反演)、考虑周期场影响的能态密度、能带修正

依据、金属的费米面形状

$$\text{紧束缚模型}:\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_m}\varphi_j(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_m)\tag{5.4}$$

$$E(\boldsymbol{k})=\varepsilon_j-\sum_{s}J(\boldsymbol{R}_s)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_s}\tag{5.5}$$

$$\int\varphi_i^*(\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{R}_s)[U(\boldsymbol{\xi})-V(\boldsymbol{\xi})]\varphi_i(\boldsymbol{\xi})\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}=-J(\boldsymbol{R}_s)\tag{5.6}$$

$$\text{最近邻近似}:E(\boldsymbol{k})=\varepsilon_j-J_0-\sum_{\boldsymbol{R}_s=\text{近邻}}J(\boldsymbol{R}_s)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_s}\tag{5.7}$$

$$\text{带底和带顶的能态密度}:N(E)=\frac{4\pi}{h^3}(2m^*)^{\frac{3}{2}}E^{\frac{1}{2}}\tag{5.8}$$

$$N(E)=\frac{4\pi}{h^3}(2|m^*|)^{\frac{3}{2}}(E_C-E)^{\frac{1}{2}}\tag{5.9}$$

6 晶体中电子的运动

波包描述条件、电子速度垂直于等能面、准动量 (晶格动量)$\hbar\boldsymbol{k}$、有效质量的意义、能带顶底的有效质量、满带与未满带、近满带与空穴、半导体与绝缘体、磁场中电子的运动、电子回旋共振、德哈斯范阿尔芬效应

$$\text{基本方程}:\boldsymbol{v}=\frac{1}{\hbar}\nabla_{\boldsymbol{k}}E(\boldsymbol{k}),\hbar\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{F}\tag{6.1}$$

$$\text{倒有效质量张量}:P_{\alpha\beta}=\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2E}{\partial k_\alpha\partial k_\beta}\tag{6.2}$$

$$\text{有效质量张量}:\boldsymbol{P}\ \text{对角化再取逆}\tag{6.3}$$

$$\text{回旋频率}:\omega_c=\frac{eB}{m^*}\tag{6.4}$$

$$\text{朗道能级}:E(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c\tag{6.5}$$

$$\text{DHVA 效应}:\Delta\left(\frac{1}{B}\right)=\frac{2\pi e}{\hbar}\frac{1}{A_F}\tag{6.6}$$