

---

1：什么因素决定了化学键的不同类型，有哪些类型，有何特点。（好像是隔年考一次）

答：原子束缚电子的能力有强弱，从而产生不同的结合力，即化学键。化学键可以分为金属键、离子键、范德瓦耳斯力、共价键。

离子键：正负离子的电子壳层饱和，电子云分布基本球对称，满足球密堆积原则，结合能大约 150 千卡每摩尔。离子键无方向性。离子晶体硬度高，强度大，脆性大，热膨胀系数小。

共价键：具有方向性和饱和性，电子云分布不是球对称。共价结合的键合能力相当强，结合能大约 150 千卡每摩尔。共价晶体强度高，硬度大，脆性大，熔沸点高，挥发性低。

金属键：电子云分布基本球对称，符合球密堆积原则。金属晶体最主要特征是共有化电子，没有方向性，没有饱和性，各向同性，结合能大约 50 千卡每摩尔。金属键良好导热性、导电性、塑性，强韧性。

分子键由瞬时的电偶极矩的感应作用而成，其特点是价电子几率分布改变不大。

范德瓦耳斯力：作用力很弱。包括分子键和氢键。氢键：由氢原子与其他负电性交道的原子团结合而成，结合能大约 10 千卡每摩尔。

分子键由瞬时的电偶极矩的感应作用而成，其特点是价电子几率分布改变不大。

3：画出点阵常数为  $a$  的二位六方晶格的第一、第二、第三布里渊区。

答：这个我就不画了。画这个的方法是：先画一个六方晶格，然后沿着两不相邻的两个角画直线，6 条直线在六方晶格中围成第一、第二、第三布里渊区。最里头的六角是第一布里渊区，

4：什么是格波，与声子有什么关系。

答：晶格中所有原子参与的一种频率相同的正则振动，称为一种振动模。由于晶格具有周

---

期性，使得振动模具有波的形式，因此称为格波。

格波的能量是以  $h\nu$  为单位量子化的，通常把这个能量量子称为声子。当格波处在  $(n+1/2)h\nu$  时，称为有  $n$  个声子，反应的是晶体集体原子运动的状态激发单元。电子与晶格振动的相互作用，可以用吸收或者发射声子来描述。而晶格振动的相互作用，可以用声子相互碰撞来描述。格波与声子，反应的是晶格振动的波粒二象性。

5：贵金属与过渡金属性质有什么不同？试举例说明（还有另外一种问法：铜和镍有什么区别？）（此题与 15 题一起貌似年年考）

答：答案见 15 题。

6：声学波与光学波有什么区别。

答：原子振动波的色散关系，称为声子能谱，而在声子能谱分支中，在 FBZ 中心附近具有  $\omega = vk$  色散关系的分支称为声学支，其他称为光学支。声学支和光学支的命名主要是由于其长波极限下的性质。

声学波描述原胞质心的运动，在长波极限下，可看成弹性波，在 FBZ 中心，谐振频率为 0。

光学波描述原胞内各原子之间的相互运动，在长波极限下，可看成极化波。波数  $K$  趋于 0，频率不为 0，而为一有限值。

声学支对理解固体的热性质和声学性质更重要，光学支则理解无机物在红外频段的光学性质。

7：晶体比热爱因斯坦模型的要点与结论。

答：晶体中各原子振动可以看做相互独立的，即所有原子具有相同的频率  $\omega_0$ 。认为每个原子有 3 个振动自由度， $N$  个原子看成  $3N$  个全同谐振子，谐振子能级为  $E = (n + 1/2)h\nu$

---

hw。

结论：得到爱因斯坦温度。

当  $T$  远大于爱因斯坦温度时， $C$  约等于  $3R$ ，与杜隆-帕梯定律相符。

当  $T$  远小于爱因斯坦温度时， $C=3R \left( \Theta/T \right)^2 \exp(-\Theta/T)$ ，即低温下爱因斯坦模型的固体比热容随温度指数下降。此趋势与实验不符，原因是忽略了谐振子之间频率的差异。

8：晶体比热容德拜模型的要点与结论。为什么极低温下德拜模型与实验相符。

答：把晶格看做各向同性的连续介质，格波用弹性波来表示， $\omega$  大于某一截止频率的短波是不存在的，使用玻色-爱因斯坦统计对声子能量计算。

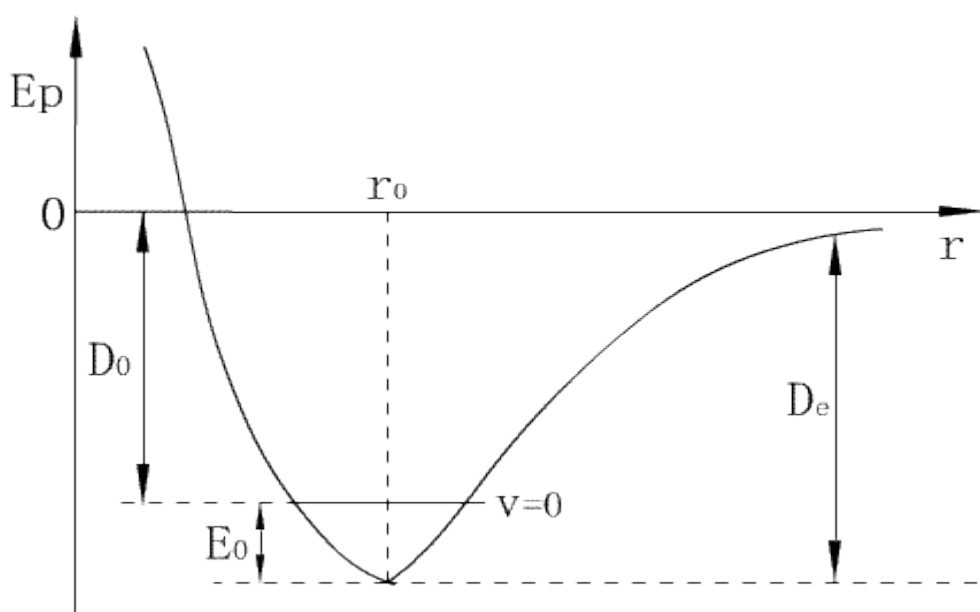
结论：一种晶体，它的热容量特征完全由它的德拜温度确定。

在低温极限下， $C_v$  正比于  $T^3$ 。

极低温下，不仅光学波得不到激发，而且声子能量大的短声学波也未被激发，得到激发的只有声子能量较小的长声学波。长声学波即弹性波，德拜模型只考虑弹性波对热容的贡献，因此德拜理论在低温的极限下是严格正确的。

9：用固体物理理论解释晶体热膨胀现象。

答：固体热膨胀是一个统计现象。当温度升高时，不是每个近邻离子间距  $R$  都上升，实际上  $R$  会在平衡间距  $R_0$  附近涨落。而势函数在平衡间距  $R_0$  附近并不是对称的，因此对于一个固定的热能  $kT$  的激发下  $R$  的膨胀几率比缩短的几率大，从而出现热膨胀。（可以画一个原子间距-势能曲线）例如：



10 : LiF 晶体热导率在远小于德拜温度时与  $T$  的三次方成正比, 而远大于  $T$  时与  $T$  的倒数成正比, 这是为什么?

答: 由热导率公式:  $K = C_v \lambda V / 3$ , 即热导率与  $C_v$ 、 $\lambda$ 、 $V$  成正比。

当  $T$  远大于德拜温度时, 平均声子数正比于  $T$ , 温度升高, 平均声子数增大, 有效碰撞的频率正比于能够与它碰撞的声子数, 因此自由程减少, 即声子平均自由程反比于  $T$ 。而在高温情况下, 晶格热容与温度无关, 因此  $K$  反比于  $T$ 。

当  $T$  远小于德拜温度时, 声子间相互碰撞作用减弱, 此时自由程由其他散射决定, 与温度无关。此时热导率随温度的变化主要决定于  $C_v$ , 而由德拜模型, 低温及线下,  $C_v$  正比于  $T$  的三次方。

11 : 试说明纯金属的电阻在高温下正比于  $T$ , 而低温下正比于  $T$  的 5 次方。

答: 纯金属的电阻率与费密面上弛豫时间成反比。温度变化对电阻的影响, 主要是通过影响弛豫时间而作用的。

当温度远大于德拜温度时, 应用经典能量均分定律,  $1/t$  与绝对温度成正比。因而电阻率

---

正比于  $T$ 。

而低温下，德拜比热理论可知，有贡献的晶格振动模式数正比于  $T^3$ ，同时有贡献的晶格振动的波数  $K$  越小，他们对  $1/t$  的贡献随  $T^2$  减小。因此，金属的电阻率在低温极限下随  $T$  的 5 次方变化。

12：硅半导体中长纵声学波是怎样对电子产生散射作用的？（此题年年考）

答：硅半导体中的电子遭到散射是由于晶体周期性势场被破坏从而产生附加势场。

在长声学波中，只有纵波在散射中起主要作用，长纵声学波传播时与气体中的声波相似，会造成原子分布的疏密变化，产生体变，及原子疏处体积膨胀，密处体积压缩。这种原子间距的变化从而使禁带宽度发生起伏。对于载流子来说，就相当于产生了一个附加的势场，破坏了原来的势场周期性，从而发生散射。

13：试分析经典理论和量子理论处理晶体振动各有什么特点。

答：经典理论认为，原子振动波是一个微观机械波，可以有一个相当复杂的在分立点阵上定义的波函数来描述。因为原子位移比晶格常数小，可以使用谐振近似。其运动方程组为  $3Nn$  个方程联立（ $N$  为晶胞数， $n$  为晶胞内原子数），可以得到  $3Nn$  个本振模式。任意晶格振动，都可以用一套本征模式线性表示。一个本征模式，称为一个格波。

量子理论处理晶格振动时，引入声子语言。声子是晶格振动的能量量子，是准粒子。当晶格振动的能量交换和相互作用可以用吸收和发射声子来描述。当一个晶格振动模处于  $(n+1/2)h\nu$  本征态时，称为有  $n$  个声子。当电子与晶格振动相互作用，其交换能量以  $h\nu$  为单位。声子能谱，可以根据波粒二象性由格波的色散关系得到。

14：说明电子有效质量的定义，其物理意义，为什么会有负的有效质量？

---

答：在晶体中电子输运半经典模型中引入有效质量，表示在外场作用下，与牛顿方程相类比，电子运动具有的相应的质量。用电子有效质量替代静止质量，使得我们可以用经典物理学表示方法来描述电子在周期势场中的运动。同时，电子有效质量包含了晶体周期势场的作用，也使得电子在周期势场中运动的处理变得简单方便。

电子有效质量是能带的二阶偏导。正有效质量意味着能带具有向上的曲率，因此负的有效质量出现在能带底附近。负的有效质量意味着由状态  $k$  到  $k + \Delta k$  时，由电子转移给晶格的动量大于外力转移给电子的动量。

15：简述碱金属、贵金属、过渡金属的能带结果的主要特点，和对性质的影响。（与第 5 题类似）

答：碱金属具有 BCC 结构，除 Li 外，碱金属价电子感受到的势是很弱的，费密面都是半径为费密波矢的球面，只能将能带填到半满。

贵金属具有 FCC 密排结构。其中的价电子量子态接近自由电子费密气体。费米面为 8 个颈状部分与面心立方晶格的 FBZ 六角面相接触。贵金属的能带与弱晶格近似差别很大，故化学性质不如碱金属活跃，贵金属费米面电子浓度较大，因此电导、热导较大。

过渡金属 5 条 d 能带与 1 条 s 能带交缠在一起，电子结构复杂，6 条能带均可能与费密面有交点，而且费米面会分成很多小碎片。过渡金属兼有共价键和金属键。D 电子为局域的，形成共价键，提供机械性能。S 电子为游离的，形成金属键，提供良好的导电、导热性能。因此过渡金属既具有良好的机械性能，又具有良好的导热、导电性能，应用广泛。不同原子价电子可以共享金属键，使得金属合金易于形成。

16：分析金属顺磁性产生的原因。

---

答：无外加磁场时，金属中的自旋相反的电子数目相同，填充到导带的同一高度。在外加磁场  $B$  作用下，自旋平行于  $B$  的电子能量下降  $\mu H$ ，自旋反平行的电子能量上升  $\mu H$ ，最终两者仍然填充到同一高度，此时两自旋态的电子并不相同，表现出平行于外磁场的顺磁性。

17：用能带理论解释金属导电与半导体导电的区别。

答：满带电子不导电：能带中每个电子对电流的贡献为  $-ev(k)$ 。由于能带函数的对称性及  $v(-k)=-v(k)$ ，处于  $k$  态与  $-k$  态的电子对电流贡献恰好抵消。外加电场时，由于  $k$  和  $k+Gn$  等价，满带状态并不改变。

部分填充能带与满带不同，尽管无外场时， $k$  态与  $-k$  态对称，总电流为 0。在外场作用下，电子分布沿  $k$  轴向一方向偏移，电子产生的电流只能部分相互抵消，从而产生电流。

金属：至少有一条能带是部分填充的，因而导电。

半导体：电子恰好填满一系列低能带，再高的能带是空的。但导带与价带间隔较小，可以通过热激发使价电子跃迁到导带形成导电能力，或通过掺杂使导带填充少量电子，或使价带缺少少量电子形成导电能力。

18：温度对 P 型半导体的电导率的影响。

答：根据自有电子理论，考虑到各种因素对电子运动的散射作用后，P 型半导体电导率可以表达为： $\sigma=pe^2t/m$ ，即电导率由载流子的浓度和迁移率决定的。

1)：温度较低时，半导体处于杂质电离区，载流子数目随温度上升而增加，温度散射主要由电离杂质决定，迁移率也随温度上升而增加，因此电导率随温度升高而增加。

2)：温度升高到晶格振动对散射起主要作用的范围时，迁移率随温度上升而下降，而此时杂质全部电离，载流子不再增加，故电导率随温度下降。

---

3): 温度升高到本征激发温度, 半导体产生大量的载流子, 这个效应远大于迁移率减少对电导率的影响, 因此电导率急剧增加。

19: 简述超导体微观图像的 BCS 理论要点。用 BCS 理论解释零电阻现象。

答: 1: 分析了传导电子与晶格之间的作用, 得出重要结论: 电子之间可以产生足够的引力, 从而克服库伦作用的排斥力而相互吸引。

2: 当电子之间存在净吸引作用时, 费密面附近的两个波矢与自旋都相反的电子形成束缚态电子对—库伯电子对。该电子对的能量低于两个独立的电子的总能量, 因此在费密能级与束缚态之间产生一个能隙。临界场、热学性质和大多数电磁性质都由能隙引起。

3: 一种元素或合金超导转变温度判据涉及费密能级上电子轨道密度和电子-晶格相互作用能  $U$ 。

4: 穿透深度和相干长度作为 BCS 理论自然结果出现。

5: 穿过超导环的磁通是量子化的。

超导体的载流子是库伯对。因此电流靠库伯对来运输。库伯对中电子的散射只是使这一对转变为另一对, 但在散射过程中总动量并不发生变化。所以电流不发生变化。

只有使库伯对破坏的散射才能使电流减小, 而这个过程的能量大于  $2\Delta$ 。在电流密度较低的情况下, 无法提供这样的能量, 因此零电阻。

20: 何为第一类超导体, 第二类超导体, 有实用价值的是哪类超导体, 为什么?

答: 第一类超导体只有一个临界磁场, 一般是简单金属。而第二类超导体有二个临界磁场, 分为上临界磁场  $H_{c2}$  和下临界磁场  $H_{c1}$ , 一般是过渡金属或者合金。



---

当  $H < H_{c1}$  时，处于超导态， $R=0$ ， $B=0$ 。当  $H > H_{c2}$  时，处于正常态。当  $H_{c1} < H < H_{c2}$  时，处于混合态， $R \neq 0$ ， $B \neq 0$ 。

有价值的是第二类超导体。因为只有它们才能制成高场强的超导磁体。第一类超导体的临界磁场一般很低，不可能制成有实用价值的磁体。

21：超导体的特性有哪些？

答：超导体显著的特性是零电阻效应和完全抗磁性。

22：确定超导转变温度的实验方法，至少说明两种。

答：零电阻现象和迈斯纳效应表明，超导体在发生正常—超导转变时电磁性质有明显的变化，由此可测定临界温度  $T_c$ 。通常将  $T_c$  定义为待测试样的电阻或磁化率等物理量变化一半时相应的温度。

1) 四引线法测超导转变温度。用四引线测量试样电阻  $R$ ，画出  $R-T$  曲线，从而确定  $T_c$ 。

电阻法比较简单。

2) 当超导试样上绕有线圈时， $T_c$  温度附近试样磁导率在 0 和 1 之间变化会造成线圈自感  $L$  或者两线圈的互感  $M$  的变化，从而确定  $T_c$ 。

3) 试样超导转变时，热容为不连续。因此可以通过测量热容来确定  $T_c$ 。

23：按紧束缚近似理论计算体心立方晶体 S 态电子的①能带表达式，②在波矢  $K$  状态下的速度，③能带底的有效电子质量。（好像是隔年考）

# 数学作业纸

(科目: )

班级:

姓名:

编号:

第

页

取立方晶系最近邻原子坐标为  $(\pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2}, 0)$   $(\pm \frac{a}{2}, 0, \pm \frac{a}{2})$   $(0, \pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2})$

$$\text{则有 } E_s(\mathbf{k}) = E_s^{(0)} - J_s^{(0)} - 4J_s^{(1)} \left[ \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right]$$

$$\text{波矢为 } \mathbf{k} \text{ 的波速: } v_x = \frac{\partial E_s}{\partial k_x} = \frac{2J_s^{(1)} a \sin \frac{k_x a}{2} (\cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2})}{\hbar}$$

$$v_y = \dots \quad v_z = \dots$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{J_s^{(1)} a^2 \cos \frac{k_x a}{2} (\cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2})}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} (0,0,0) = 2J_s^{(1)} a^2$$

$$\text{波矢为 } \mathbf{k} \text{ 的波速: } v_x = \frac{\partial E_s}{\partial k_x} = \frac{2J_s^{(1)} a \sin \frac{k_x a}{2} (\cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2})}{\hbar}$$

$$v_y = \dots \quad v_z = \dots$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2}}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} = \frac{J_s^{(1)} a^2 \cos \frac{k_x a}{2} (\cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_z a}{2})}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} (0,0,0) = 2J_s^{(1)} a^2$$

$$\therefore m^* = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2J_s^{(1)} a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2J_s^{(1)} a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2J_s^{(1)} a^2} \end{pmatrix}$$

$$\text{3. 89 取立方晶系最近邻原子坐标为 } (\pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2})$$

$$(0,0,0) \quad (0,0,0) \quad (0,0,0) \quad (0,0,0) \quad (0,0,0)$$

$$E_s(k) = E_s^{(0)} - J_s^{(0)} - 8 J_s^{(1)} \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

$$V_x = \frac{4}{\hbar} \cdot J_s^{(1)} a \sin \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

$$V_y = \frac{4}{\hbar} \cdot J_s^{(1)} a \cos \frac{k_x a}{2} \sin \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}$$

$$V_z = \frac{4}{\hbar} \cdot J_s^{(1)} a \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \sin \frac{k_z a}{2}$$

$$m^d = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_x \partial k_x} \quad \dots \quad m^d_{yy} = \frac{\hbar^2}{2 J_s^{(1)} a^2}$$

$$m^d_{yy} = \frac{\hbar^2}{2 J_s^{(1)} a^2} = m^i$$

$$\therefore m^d = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2 J_s^{(1)} a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2 J_s^{(1)} a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2 J_s^{(1)} a^2} \end{pmatrix}$$

24：用近自由电子理论说明禁带产生的物理原因（此题考的少）

答：根据微扰理论，近自由电子的能带可以表示为自由电子能量与自由电子能量一波矢关

系的修正之和，而修正主要是由于波矢差为倒易格矢量的自由电子量子态之间的微扰造成的。对于能量较低的能带，当其与能量较高的量子态发生微扰时，二级微扰求和项一定是负数，使低能带形状向下弯曲，反之向上弯曲，结果使能带分裂成不连续的函数，从而相邻能带之间存在不为零的最小能量差，即为禁带。

25：对于限制在边长为  $L$  的立方体中的  $N$  个自由电子，求单位能量间隙中的状态数，费米半径，绝对零度的费米能，费米动量，费米速度，费米温度，费米波长。（比 23 题考的少）

假设电子为自由电子  
 则有  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$   
 又  $2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} k_F^3 = N$   
 $\therefore$  费密半径  $k_F = 2\pi \left( \frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} n^{1/3}$  其中  $n = \frac{N}{V}$   
 而单位能量间隙的状态数  $g(E) dE = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi k^2 dk$   
 $\therefore g(E) = 4\pi V \cdot \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$

$\therefore$  单位能量间隔的状态数  $g(E)dE = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi k^2 dk$   
 $\therefore g(E) = 4\pi V \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot E^{\frac{1}{2}}$   
 绝对零度费米能:  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$   
 费米动量:  $p_F = \hbar k_F$   
 费米速度:  $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$   
 费米温度:  $T_F = E_F / k_B$   
 费米波长:  $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$

26：何为布洛赫定理，布洛赫函数有哪些性质，何为布洛赫电子？

答：周期性势场中运动的单电子称为布洛赫电子。其波函数可以由一个平面波和周期性函数的乘积来表示，周期性函数的周期与晶格周期相同，即为布洛赫定理。

布洛赫函数的性质： $U(r+R)=U(r)$ 。