## 1例举经典物理学的困难?并简述?

黑体辐射经典解释不成立, 低频时与实验比较温和, 高频时不符;

光电效应中经典物理不能解释临界频率、每个光子能量只与频率有关,与光强无关,光 强只影响光子的数目;

## 2什么是德布罗意波?

与自由粒子相联系的单色平面波,或称为描写自由粒子的平面波,这种写成复数形式的 波称为德布罗意波。

# 3什么实验可以证实电子波动性?

戴维孙、革末电子衍射实验;约恩逊的单、双、三、四缝电子衍射实验;中子在 Na 单晶晶体上的衍射。

# 4测不准原理(不确定原理)的内容是什么?简单解释原因?意义?

测不准原理说明, 既无法同时准确测得动量和位置, 也无法同步准确测得能量和时间。即经典力学量是不可能同时被准确测得的。

解释:任何一种测量手段,在测量某物理量的同时,必定带来对其对应物理量的干扰,使得这一对物理量无法同时被准确测得。

意义:为衡量微观和宏观问题的界限提供了理论依据,体系的作用量与h相比拟时,经典力学不再适用。

# 5.坍缩是什么?

概率函数瞬间集中于一点的行为。

#### 6波函数描述了什么?其统计解释?标准条件是什么?

微观粒子的运动状态(任意力学量的平均值、可能值及相应的几率); 波函数在空间某一点的强度(波函数的模方)和在该点找到粒子的几率成正比。 有限性:不可能无限扩展;单值性:一对一的;连续性(波函数及其导数连续)

## 7含时薛定谔方程形式

# 8概率流密度是什么?公式为?连续性方程?

粒子在t时刻r点周围单位体积内粒子出现的几率即几率密度。

公式: 
$$\bar{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

## 9定态是什么? 定态薛定谔方程形式? 定态波函数形式? 定态性质特点?

定态即定常势场,就是边界条件稳定,除边界条件以外的势场恒常不变,即整个势场都不随时间变化。

性质特点: (1) 粒子在空间概率密度与时间无关; (2) 概率流密度与时间无关; (

3) 任何不显含 t 得力学量平均值与 t 无关; (4) Ψ 描述的状态其能量有确定的值;

# 10隧道效应是什么?透射系数指什么?物理意义?其计算式?势垒宽度、粒子

# 质量能量变化,透射系数怎么变?任意形状势垒的计算?

粒子能够穿透比它动能更高的势垒的现象;

透射波几率流密度与入射波几率流密度之比;

描述贯穿到 x > a 的 III 区中的粒子在单位时间内流过垂直 x 方向的单位面积的数目与入 射粒子(在x<0的I区)在单位时间内流过垂直于x方向单位面积的数目之比;

任意形状势全: $D_{\mathbf{n}}e^{-\frac{2\pi}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_{\mathbf{n}}-E)}}$ 

 $D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(V(x) - E)}dx}$ 

## 11简并含义?简并度?

对于一个本征值(能量),有多个状态(波函数)与它相对应。 和一个本征值(能量)相对应的状态(波函数)的个数。

## 12 简述定态微扰的基本思想?

在外力作用下,势场 V 发生的变化与原势场相比很小,可看做在原势场上叠加一小量。在 原来精确解的基础上, 应用近似解法, 得到一个合理的结论。

## 13 简并定态微扰的零级波函数是什么?能量的一级近似?

## 14 简述泡利不相容原理?

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。

## 15 微观粒子与宏观粒子的状态描述方法有何不同?

量子力学是用波函数来说明粒子出现在空间某一点的概率、是不确定的 经典力学描述的是确切的粒子位置和状态.

#### 16 全同性原理描述了什么?

把质量、电荷、自旋、以及其他内部固有属性完全相同的粒子称为全同性粒子、同一微观 体系中,全同微观粒子不可区分

### 17 如何判别粒子是否出现量子效应? 、

测不准原理、互补原理、全同性原理

## 18 原子中电子运动状态的四个量子数物理意义及作用是什么?

主量子数 n 决定电子能量的全部或主要部分, n 越小, 能级越低;

角量子数1决定电子绕核运动的角动量的值,决定电子能量的次要部分,n相同,1越小, 能级越低;

磁量子数 ml 确定 L 在外磁场方向的分量;

自旋量子数 ms 决定电子自旋角动量 S 的空间取向。

#### 19 如在势能 U(r)上加一常数 C,则其薛定谔方程的定态解将如何变化? 试说明此

变化为什么观察不到(选择无穷远处的 U 为 0)

解:设在势能U(r)上加一常数C,则薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t) + [U(r) + C]\Psi(r,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial \pi}\Psi(r,t)$$

设  $\Psi(r,t) = \Psi(r)e^{-i(E+c)t/\hbar}$ , 代入上式得定态方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) + U(r)\Psi(r) = E\Psi(r)$$

在定态方程中没有C出现,故定态解没有发生变化。仅在 $\Psi(r,t)$ 中多了一项 $e^{-ict/\hbar}$ ,该项在 $|\Psi(r,t)|^2$ 中不出现,因此实际观察不到。

20 简答: 氢原子处在 n=3 时有多少个不同的状态? 在考虑电子自旋的情况下, 写出状态的量子数。

考虑自旋18种;

(n,l,ml,ms)=(1,0,0,1/2),(1,0,0,-1/2),路.....

21 简答:为什么不能将氦原子中的两个电子加以区分?对两个分离的氢原子的电子的区分有无困难?对一个双原子氢分子又如何?

经典理论认为电子有确定的轨道。量子力学只能给出电子出现在某处的概率,不能断言电子在某处出现。氦原子中的两个电子出现在氦原子核的附近,两个电子可能出现的空间是重叠的,当探测到一个电子时,被观测到的电子可能是两个电子中的任何一个,因而不能区分这两个电子。两个氢原子中的两个电子的运动区域是分离的,其中一个电子可在某一个氢原子核周围出现,而另一个电子在这一区域出现的概率为 0,这样的两个电子是可以区分的。在双原子氢分子中,两个电子可以交换形成共价键。两个电子可能出现的区域是重叠的,这时的电子也无法区分。

22 比较三个统计分布的假设、结果。说明在什么情况下量子统计可以近似到经典统计。

当粒子自由程和动量的乘积远大于普朗克常数时(不受测不准原理的限制)可近似。

#### 23 晶体的特点?

长程有序、各向异性、固定的熔点、解理性、自限性

## 24 解释以下概念

(1)布喇菲点阵

用点取代基元,晶体结构被抽象为由一些完全相同的点在空间规则排列的点阵。

(2)基元

有一种或多种原子构成的晶体的基本单元

(3)固体物理学原胞

只含有一个格点, 体积最小的重复单元

(4)结晶学原胞

能够反应出整个格子的对称性,体积较大的重复单元

(5)简单格子

晶体由完全相同的一种原子组成, 原子和格点重合

(6)复式格子

基元不是由一种原子构成,而是由一种以上的多种原子构成(下略)

# 25 原胞的定义?特点?

只含一个格点、体积最小的重复(周期)单元。

特点:格点在原胞的顶点;每个原胞只含一个格点;原胞是体积最小的重复(周期)单元。

□原胞的选取非唯一, 但体积都相同。

## 26 晶向指数与晶面指数的表示方法。

晶向指数:表示晶列的方向。[111213]。等效晶向?111213?晶面指数:表示晶面的方向和面间距。(h1h2h3)。等效晶面{h1h2h3}

## 27 什么是布洛赫电子,与自由电子的波函数,能量及动量作比较。

由布洛赫波函数确定的电子或者在周期性势场中运动的电子

(1) 波函数

前者在周期性势场中运动,后者在一般性势场中运动

(2) 能量

都是分立的。前者形成能带结构,后者无

(3) 动量

对前者为准动量。自由电子的不知道(=。=

#### 28 自由电子、束缚态粒子以及晶体中的电子、三者的能量状态有何不同。

自由电子:连续 束缚态粒子:分立

晶体中的电子:准连续分布,能带结构

#### 29 引入有效质量的意义?

电子的有效质量和电子的准动量这两个人为引入的物理量,使我们可以在形式上不必考虑复杂的晶格力(晶格对电子的作用是量子效应),而只考虑外场力对电子运动的影响。

#### 29 说明有效质量与惯性质量的不同

有效质量包含了周期场的影响;前者是对外力的响应,后者是对合力的响应

## 30 从能带底到能带顶, 布洛赫电子的有效质量将如何变化? 外场对电子的作用效

## 果有什么不同?

能带底,有效质量为正,能带顶,为负。

能带底,电子从外场获得的动量大于电子传递给晶格的动量

能带顶, 电子从外场获得的动量小于电子传递给晶格的动量

# 31 什么是空穴? 它有哪些基本特征?

当满带附近有空状态 k'时,整个能带中的电流,以及电流在外场作用下的变化,完全如同存在一个带正电荷 q 和具有正有效质量 $|mn^*|$ 、速度为 v ( k') 的粒子的情况一样,这样假想的粒子称为空穴。

- 1. 带有正电荷 e
- 2. 具有正有效质量的准粒子
- 3. 代表的是近满带中所有电子的集体行为,不能脱离晶体而单独存在

# 32 在什么条件下, 晶体中电子的运动可以看作是波包的运动? 其运动的速度, 加

# 速度和有效质量如何表示?

# 33 导体,绝缘体和半导体的能带结构有什么不同?

导体:能带中一定有不满带

绝缘体:能带中只有满带和空带

半导体:能带中只有满带和空带,但禁带宽度较窄,一般小于 2ev

## 33 什么是简谐近似? 非简谐近似? 在两种近似下,晶格振动的格波性质有何不

#### 同? 试举例说明简谐近似的局限性。

简谐近似:原子在其平衡位置附近,原子间的互作用势能与位移的关系可近似看做抛物线, 作用力可视为虎克力,由此得出原子在其平衡位置附近做简谐运动。

非简谐近似:由势能展开式中的三次或三次以上的高次项引起的效应

局限性:1.没有热膨胀2.力常数不依赖于温度和压力3.高温时热容量是常数

- 4. 声子间不存在相互作用,声子的平均自由程和寿命都是无限的。或说:两个格波之间不发生相互作用,单个波不衰减或不随时间改变形式
- 5. 完美简谐晶体的热导是无限大的

简谐近似认为不同格波间是完全独立的,即不同声子之间没有相互碰撞,声子之间没有能量交换,平均自由程无限大。

非简谐作用使不同格波之间发生耦合,用"声子"的语言表述,即是声子间存在"碰撞"。声子正是通过这种碰撞交换能量,达到统计平衡。声子的碰撞使其平均自由程变为有限,此外,固体中缺陷对声子的散射也会对平均自由程产生贡献。

# 34 说明格波与连续介质弹性波有何不同?

格波传播的速度是波矢的函数, w 与 q 的关系称为色散关系。格波限制在一个布里渊区里, 在这之外的值不能提供新的振动形式。在长波近似条件下,格波类似于连续介质波。

# 35 比较单原子晶格和双原子晶格的色散关系。

单原子晶格的振动只有声学支,没有光学支。双原子晶格的振动则同时有声学支和光学支。

# 36 什么是声子? 声子有哪些性质? 意义?

格波的能量单元(或称能量量子)称为声子。

意义: (1) 生动的反映了晶格振动能量量子化的特点。

(2) 处理晶格振动有关的问题时,可以更加方便和形象。

(例, 晶格振动对电子波、光波的散射等。)

性质:1、声子是准粒子。不能离开晶格而独立存在。动量不确定。

- 2、声子是玻色子。不可区分,不受泡利不相容原理限制。
- 3、粒子数目不守恒。与温度有关。
- 4、声子具有零点能。

# 37 试用声子语言描述晶格的振动?

晶格振动时产生声子,声子的能量是 , 是声子频率, 共有 种不同模式。一个格波, 也就是一种振动模, 称为一种声子。如果振动模从基态(能量为 ) 激发到能量为的激发态, 那么就产生了能量为 的 个声子。共有 支声学声子, 支光学声子。

#### 38 什么是晶格振动的光学波和声学波?它们有什么本质的区别?

色散关系中,频率较低的一支称为声学波,频率较高的一支称为光学波。 长声学波代表原胞质心的平动,q=0 的极限情况则代表整个晶体的平动。 光学波的长波极限描述的是同一原胞中两个原子相对于质心的振动。

#### 39 爱因斯坦模型的结果与热容实验曲线的差异? 分析原因。

在高温情况下,与实验符合较好。在低温情况下,爱因斯坦模型比实际情况衰减的更快,与实验结果差别较大。

原因:爱因斯坦模型忽略了各格波的频率差别。对光学波适用,对声学波不适用,低温下,与假设不符。

#### 40 德拜模型比爱因斯坦模型有何重要发展?

把格波看成弹性波,并假定纵的和横的弹性波的波速相等。在低温情况下,与实验相符。

#### 41 何谓正常过程、倒逆过程?它们对晶体热阻有何影响?

正常过程:合成 q 仍在第一布里渊区中,只改变动量分布,对热阻没有贡献。 倒逆过程: 合成 q 超过第一布里渊区,破坏热流方向,对热阻有贡献。

#### 42 分析声子的热导率与温度的关系。

43 分析金属的电导率与热导率的关系。

$$\kappa \approx \frac{\pi^2 N k_0^2 T \tau_F}{3m^*} \qquad \sigma = \frac{N e^2 \tau_F}{m^*} \quad \frac{\kappa}{\sigma} = \frac{1}{3} (\frac{\pi k_0^2}{e})^2 T \quad C_{WF} = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{1}{3} (\frac{\pi k_0^2}{e})^2$$

# 44 了解晶格振动谱的实验测定方法

中子的非弹性散射;光子的非弹性散射

44 晶格常数为 a 的简立方、体心立方、面心立方的倒格子是什么? 其参数分别为? 布里渊区的形状为?

简立方:边长为 2Pi/a 的简立方、立方体

体心立方: 边长为 4Pi/a 的简立方、十二面体

面心立方: 边长为 4Pi/a 的简立方、十四面体或裁角八面体

45 金属电子气模型在将什么看作零级近似?适用范围?结论?

46 在讨论晶体中的电子状态时,应用了紧束缚方法和准自由电子方法。这两种方法均采用了微扰理论,试问这两种方法分别将什么看作零级近似?什么看作微扰?各自的适用范围有何不同?其结论为?