

2013 年高等固体物理期末考试题

一、简述题（每题 5 分）

- 1、画出三维、二维和一维自由电子气体体系的能量态密度并说明其不同之处。
- 2、列举纳米体系的基本物理效应。
- 3、列举金属材料低温电阻反常上升的可能原因。
- 4、简述光子晶体如何实现原子自发辐射的抑制。
- 5、什么是 Ising 模型？一维和二维 Ising 模型体系有什么本质不同。
- 6、什么是金属等离激元，简述它在纳米科技中的应用。
- 7、什么是渗流相变？渗流集团的特点是什么？
- 8、什么是单电子器件？简述其工作原理。
- 9、简述激光冷却和挥发冷却的原理。
- 10、画出交换关联泛函的 Jacob 阶梯图。
- 11、简述电荷密度波的产生机理。
- 12、什么介观体系？它的本质特征是什么？
- 13、简述无序体系的 Anderson 局域化的内容。
- 14、简述碱金属原子团簇中的幻数规律性。

二、STM 的工作原理，列举其在纳米世界探索及扮演的主要角色内容（10 分）

三、简述整数和分数量子 Hall 效应，并列举他们的异同点（10 分）

四、写出 Hubbard 模型 Hamilton 量，并讨论 Mott-Hubbard 相变（10 分）

1. LDA, GGA, 低估能, 离域误差大小

LDA (局域密度近似): 是密度泛函理论的其中一类交换相关 能量泛函中使用的近似。该近似认为交换相关能量泛函仅仅与电子密度在空间各点的取值有关。

GGA (广义梯度近似): 由于 LDA 是建立在理想的均匀电子气模型基础上, 而实际原子和分子体系的电子密度远非均匀的, 所以通常由 LDA 计算得到的原子或分子的化学性质往往不能够满足化学家的要求。要进一步提高计算精度, 就需要考虑电子密度的非均匀性, 这一般是通过在交换相关能泛函中引入电子密度的梯度来完成, 即广义梯度近似 GGA。

低估能:

离域误差大小:

2. 以 kohn 雪花为例, 说明分形, 分形维数

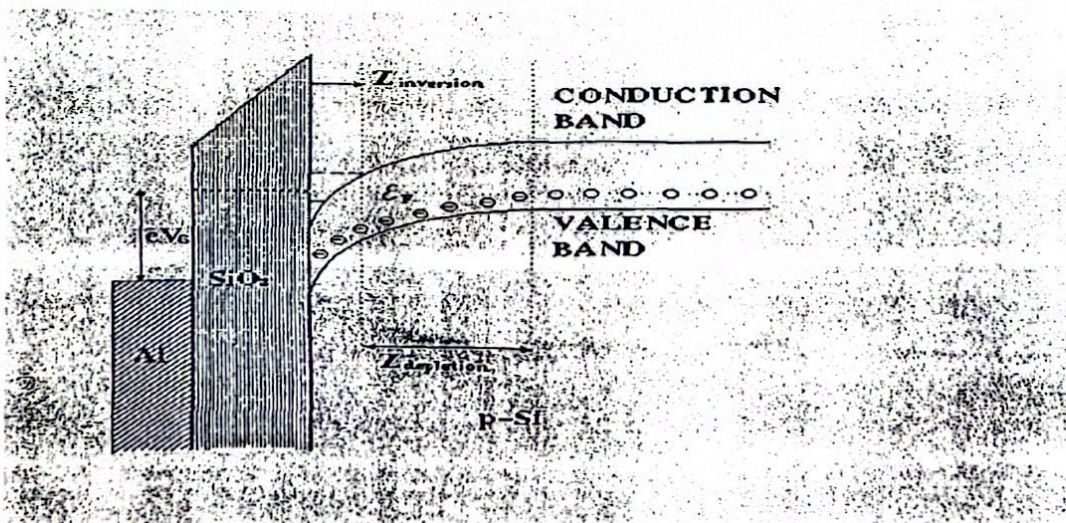
自相识性: 缩放对称性, 即不管对结构作怎样的放大与缩小, 结构看上去仍是相同的。

分形: 存在自相似性的几何对象。

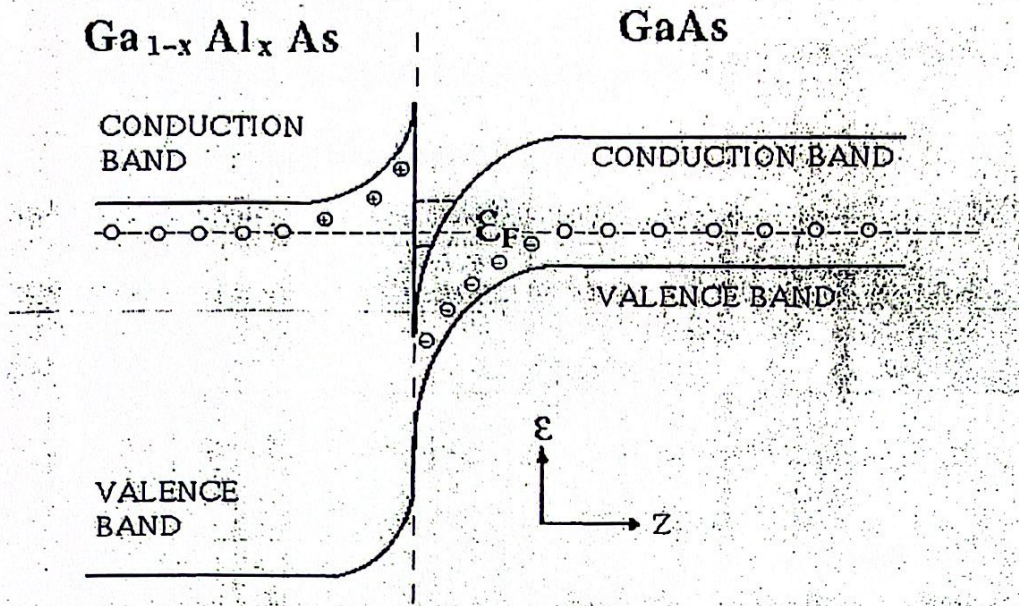
分形维数:
$$d = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\log N(\epsilon) / \log (\frac{1}{\epsilon})]$$

ϵ 是小立方体一边的长度, $N(\epsilon)$ 是用此小立方体覆盖被测形体所得的数目, 维数公式意味着通过用边长为 ϵ 的小立方体覆盖被测形体来确定形体的维数。

3. Si 反型层能带示意图



GaAs-AlGaAs 异质结



4. 团簇中的位置序，动量序指什么

位置序（位置序是经典粒子的特征）和动量序（动量序则是德布罗依波的特征）

物理原因：团簇的幻数序列与构成团簇的原子键合方式有关

在团簇形成过程中那种序占主要位置，要看粒子间距 a 是否达到德布罗意波长量级，粒子动能是否与平均热能

相近：

$$\text{平均热能: } \frac{3}{2} k_B T \quad \text{粒子动能: } \frac{1}{2} m v^2$$

$$\text{粒子间距 } a \sim \lambda = \frac{h}{m v} \Rightarrow T_0 \equiv \frac{h^2}{3 m k_B a^2}$$

$T > T_0$: 德布罗依波长小于原子之间间距

团簇内粒子的位置序占主导地位

$T < T_0$: 德布罗依波长大于原子之间间距

团簇内动量序或波序占主导地位

一般金属原子: $T_0 \approx 60K$ 轻元素(He等): $T_0 \approx 5K$

5. Kohn-Sham 方程的物理意义

凝胶模型的结果对所有密度定性上是相同的。

在KS方程中，整个能量的主要贡献来自单电子本征值，其他部分的贡献与团簇结构分布无关。电子约束于球形凝胶区域导致壳层结构。

6. 非晶固态材料，怎么判断是钢球无规模型还是连续无规网络模型

适应和非晶态固体的缺陷

刚球无规密堆模型 非晶态金属或金属合金 DRPHS Finney:793 个硬球模型非晶具有一些不同类型的局域短程序。

以原子为中心作其最近邻的连心线。以这些连心线为棱边所构成的多面体→Bernal 多面体。

连续无规网络模型 (CRN): 以共价结合的非晶态固体，最近邻配位与晶态类似。用球代表原子位置，线段代表大

小，线段间的夹角代表键角，所有球和线段组成的网络 - 非晶网络模型

缺陷：非晶半导体 1 悬挂键 2 微孔 3 杂质

7. 以能态密度为例，说明什么是迁移率边

无序固体最重要的特征就是定域态的存在。

迁移率边：中等无序时体系既存在扩展态也存在局域态，扩展态在 TBA 能量中心，局域态在带尾，并有一个划

分局域态和扩展态的能量的分界称为迁移率边。 E_c 或者 E_v 是将分开的能量，费米面在扩展态区时有非零电导，

在局域态时，绝对零度时电导率为 0，模特把 E_c 、 E_v 称为迁移率边。

8. 什么是元激发，准粒子

元激发：有相互作用的多粒子体系的低能激发态，可以看成是一些独立的基本激发单元的集合，它们具有确定的能量，有时还有确定的动量，这样的准粒子称为元激发。

元激发分类：

(1) 集体激发 (多为 Bose 型):

- ① 离子-离子相互作用引起的晶格振动--声子(phonon);
- ② 磁性材料中的自旋-自旋相互作用引起的自旋波--磁振子(magnon);
- ③ 金属中电子气相互作用引起的等离子体集体振荡--等离子激元(plasmaron);
- ④ 光子和光学模声子耦合 - 极化激元(polariton)

(2) 个别激发 (多为 Fermi 型):

- ① 正常金属中相互作用的电子，变换成屏蔽电子或准电子，其有效质量增大(quasi-electron);
- ② 离子晶体中的电子或空穴在运动时带着周围极化场一起运动而形成的极化子(polaron);

③半导体中的电子和空穴对(electron-hole pair)

准粒子：从量子力学上讲，准粒子实际上是一种量子能，它存在于一个晶体点阵或其它相互作用的粒子系统中。基于它具有可量度的空间坐标参数和动量值，因此人们通常称其为准粒子，即有点象粒子，但本质却不是

9. 以 C 为例，说明杂化轨道，说明是 C 还是 Si 更易形成 π 键，为什么

10.量子限域效应和表面效应为光学吸收的影响，原因

量子限域效应导致的蓝移而表面效应导致的红移，量子限域效应：激子带的吸收系数随粒径下降而增加，即出现激子增强吸收并蓝移，表面原子贡献出禁带中的态导致红移。

11.画出非弹性隧道谱

12.临界现象的标度普适率的物理根源是什么

考虑系统在相变点的对称性，从求解体系的配分函数到寻找能够保持系统不变的对称变换。由于体系具有标度不变性，故普适临界指数应该能够描述此对称性

二. $H = - \sum J \sigma \sigma$, 一维伊辛键格

在 $J > 0$, 极低温度下，体系是否处于铁磁基态，用重整化方法证明

解

For 1-D Ising model (无外磁场), 有 Hamiltonian: $H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j (\sigma_{i,j} = \pm 1)$

考虑 partition function: $Z = Tr[e^{-\beta H}]$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ define: $K = J \cdot \beta$, 则 PF 写为:

$$Z = \sum_{\text{all-spins}} \exp[K \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j] , \text{ for 1-D Ising chain, 原式=}$$

$$Z = \sum_{\text{all-spins}} \exp K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5 + \dots)$$

$$= \sum_{\text{all-spins}} \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3) + K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5) + \dots]$$

$$= \sum_{\text{all-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)] \cdot \exp[K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5)] \times \dots \}$$

$$= \sum_{\text{odd-spins}} \sum_{\text{even-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)] \cdot \exp[K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5)] \times \dots \}$$

现用重整化方法对该自旋体系“粗粒化”：

先对偶数自旋求和，由于 $\sigma_{2k} (k \in Z) = \pm 1$, 故

$$\sum_{\text{even-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3)] \cdots \}$$

$$= \{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_3)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_3)] \cdots \}$$

即原式变为:

$$Z = \sum_{\text{odd-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_3)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_3)] \cdots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma_3 + \sigma_5)] + \exp[-K(\sigma_3 + \sigma_5)] \cdots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma_5 + \sigma_7)] + \exp[-K(\sigma_5 + \sigma_7)] \cdots \} \cdots$$

Redefine: $\sigma_{2k-1} = \sigma'_k$, 则上式变为:

$$Z = \sum_{\text{odd-spins}} \{ \exp[K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] + \exp[-K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] \cdots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma'_2 + \sigma'_3)] + \exp[-K(\sigma'_2 + \sigma'_3)] \cdots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma'_3 + \sigma'_4)] + \exp[-K(\sigma'_3 + \sigma'_4)] \cdots \} \cdots$$

为保持标度变换不变, 此式必与 $Z = \sum_{\text{all-spins}} \exp K(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_5 + \cdots)$ 同形式, 则:

$$\exp[K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] + \exp[-K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] = f(K) \exp(K' \sigma'_1 \sigma'_2), \text{ 其中 } K \rightarrow K' \text{ 为 rescaling.}$$

对于上述方程, 分别令 $\sigma'_1 \sigma'_2 = \pm 1$, 可得方程组:

$$\exp(2K) + \exp(-2K) = f(K) \exp(K') \text{ 和 } 2 = f(K) \exp(-K')$$

$$\text{由第二式得: } \exp(K') = f(K)/2, \text{ 代入第一式得: } K' = \frac{1}{2} \ln[2 \cosh(2K)].$$

由此超越方程可知 (画图易得两个临界点), 此标度变换的不动点为: $K' = 0$ & ∞ , 分别对应稳定点温度 $T = \infty$ 和非稳定点温度 $T = 0$ 。由此可知, 由于在有限温度内该标度变换无临界点, 故极低温(非零)条件下不发生相变。当 $J > 0$ 时, 零温条件下为保证 Heisenberg Hamiltonian 能量最低, 自旋需平行, 即零温下体系处于铁磁基态。由于不发生铁磁序向顺磁序的转变, 故极低温条件下体系仍处于铁磁基态。

三. 两电子波函数为 4a, 4b. 写出 H-F 理论下的波函数, 并写出两电子的单电子方程

$$\text{H-F 方程为: } \Phi = (N!)^{-\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} f_1(r_1 s_1) & \cdots & f_1(r_N s_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_N(r_1 s_1) & \cdots & f_N(r_N s_N) \end{vmatrix}$$

四. 以自由能为序参量的相变理论 $F(T, \eta) = F + a(T - T_c)\eta + B\eta^3$

1. 证明

2.若外加磁场 h , 则 $F(T, \eta)$ 会多加 $-h\eta$ 项

二级相变理论可以从系统的自由能 Φ 出发来建立, Φ 是压力 P 、温度 T 和序参量 η 的函数。二级相变中状态变化的连续性意味着 η 的值在相变点可以任意取小, 在相变点附近自由能可以展开为 η 的幂级数。对于标量情形的序参量 η , 自由能写作

$$\Phi(P, T, \eta) = \Phi_0 + \alpha\eta + A\eta^2 + C\eta^3 + B\eta^4 + \dots \quad (1)$$

式中 Φ_0 是高对称相的自由能, 其值和相变发生与否无关, α, A, C, B 是系统的参数, 依赖于 T 和 P 变化。下面将以温度作宏观变量导出相变。

稳定条件要求, Φ 作为 η 的函数应取极小值, 即满足

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\eta}\right) = 0, \left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2}\right) > 0 \quad (2)$$

结合 (1) (2) 可以得到序参量 η 的平衡值。对于高对称相, $T > T_c$, 平衡值 $\eta = 0$, 要求 $A > 0$; 对于低对称相, $T < T_c$, η 取非零值, 要求 $A < 0$ 。在相变点附近近似认为, 二次项系数 A 是温度的线性函数, 即

$$A(P, T) = a(P)(T - T_c) \quad (3)$$

假定对于 η 和 $-\eta$, 系统发生对称破缺的可能性相同, 忽略掉高次项, 系统的自由能可以写成

$$\Phi(P, T, \eta) = \Phi_0 + A(P, T)\eta^2 + B\eta^4 \quad (4)$$

从 $\partial\Phi/\partial\eta = 0$, 可以得到

$$\eta(A + 2B\eta^2) = 0 \quad (5)$$

这是一个含有系统序参量与温度和压力的关系, 称为状态方程。从这个方程得到 η 的两个解为

$$\eta = 0 \quad (6)$$

和

$$\eta = \pm \left(-\frac{A}{2B}\right)^{1/2} = \pm \left[\frac{a(T_c - T)}{2B}\right]^{1/2} \quad (7)$$

对于 $T \geq T_c$, $\eta = 0$ 的相是稳定的, 但是当 $T < T_c$ 时, $\eta = 0$ 对应于自由能取极大值, 只有非零解才是稳定的, 相应于有序的出现。(7) 中的序参量对温度的依赖关系表明, 在相变点转变是连续的。

1. LDA, GGA, 低估能, 离域误差大小
2. 以 kohn 雪花为例, 说明分形, 分形维数
3. Si 反型层能带示意图
4. 团簇中的位置序, 动量序指什么
5. Kohn-Same 方程的物理意义
6. 非晶固态材料, 怎么判断是钢球无规模型还是连续无规网络模型适应
7. 以能态密度为例, 说明什么是迁移率边
8. 什么是元激发, 准粒子
9. 以 C 为例, 说明杂化轨道, 说明是 C 还是 Si 更易形成 π 键, 为什么
10. 量子限域效应和表面效应为光学吸收的影响, 原因
11. 画出非弹性隧道谱
12. 临界现象的标度普适率的物理根源是什么

二. $H = -\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$, 一维伊辛键格

在 $J > 0$, 极低温度下, 体系是否处于铁磁基态, 用重整化方法证明

三. 两电子波函数为 $4a, 4b$. 写出 H-F 理论下的波函数, 并写出两电子的单电子方程

四. 以自由能为序参量的相变理论 $F(T, \eta) = F_0 + a(T - T_c)\eta^2 + B\eta^4$

1. 证明

2. 若外加磁场 h , 则 $F(T, \eta)$ 会多加 $-h\eta$ 项

12. 考虑系统在相变点的对称性, 从求解体系的配分函数到寻找能够保持系统不变的对称变换。由于体系具有标度不变性, 故普适临界指数应该能够描述此对称性。

二. For-1-D-Ising-model (无外磁场), 有 Hamiltonian: $H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j$ ($\sigma_{i,j} = \pm 1$)

考虑 partition function: $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ define: $K = J \cdot \beta$, 则 PF 写为:

$$Z = \sum_{\text{all-spins}} \exp[K \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j], \text{ for 1-D Ising chain, 原式=}$$

$$Z = \sum_{\text{all-spins}} \exp K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5 + \dots)$$

$$= \sum_{\text{all-spins}} \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3) + K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5) + \dots]$$

$$= \sum_{\text{all-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)] \cdot \exp[K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5)] \times \dots \}$$

$$= \sum_{\text{odd-spins}} \sum_{\text{even-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)] \cdot \exp[K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5)] \times \dots \}$$

现用重整化方法对该自旋体系“粗粒化”:

先对偶数自旋求和, 由于 $\sigma_{2k} (k \in Z) = \pm 1$, 故

$$\sum_{\text{even-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)] \dots \}$$

$$= \{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_3)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_3)] \dots \}$$

即原式变为:

$$Z = \sum_{\text{odd-spins}} \{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_3)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_3)] \dots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma_3 + \sigma_5)] + \exp[-K(\sigma_3 + \sigma_5)] \dots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma_5 + \sigma_7)] + \exp[-K(\sigma_5 + \sigma_7)] \dots \} \dots$$

Redefine: $\sigma_{2k-1} = \sigma'_k$, 则上式变为:

$$Z = \sum_{\text{odd-spins}} \{ \exp[K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] + \exp[-K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] \dots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma'_2 + \sigma'_3)] + \exp[-K(\sigma'_2 + \sigma'_3)] \dots \} \cdot$$

$$\{ \exp[K(\sigma'_3 + \sigma'_4)] + \exp[-K(\sigma'_3 + \sigma'_4)] \dots \} \dots$$

为保持标度变换不变, 此式必与 $Z = \sum_{\text{all-spins}} \exp K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5 + \dots)$ 同形式,

则: $\exp[K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] + \exp[-K(\sigma'_1 + \sigma'_2)] = f(K) \exp(K' \sigma'_1 \sigma'_2)$, 其中 $K \rightarrow K'$ 为

rescaling.

对于上述方程, 分别令 $\sigma'_1\sigma'_2 = \pm 1$, 可得方程组:

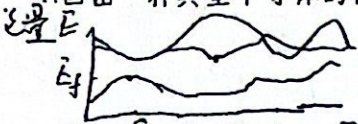
$$\exp(2K) + \exp(-2K) = f(K)\exp(K') \text{ 和 } 2 = f(K)\exp(-K')$$

由第二式得: $\exp(K') = f(K)/2$, 代入第一式得: $K' = \frac{1}{2} \ln[2 \cosh(2K)]$.

由此超越方程可知 (画图易得两个临界点), 此标度变换的不动点为: $K' = 0$ & ∞ , 分别对应稳定点温度 $T = \infty$ 和非稳定点温度 $T = 0$ 。由此可知, 由于在有限温度内该标度变换无临界点, 故极低温 (非零) 条件下不发生相变。当 $J > 0$ 时, 零温条件下为保证 Heisenberg Hamiltonian 能量最低, 自旋需平行, 即零温下体系处于铁磁基态。由于不发生铁磁序向顺磁序的转变, 故极低温条件下体系仍处于铁磁基态。

一、概念题

1. 画出一种典型半导体的能带结构图, 说明从图中能得到哪些物理量? (一)



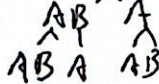
2. 什么是光子晶体? 写出光子晶体的 Bloch 定理。(一)

电磁波 \rightarrow 折射率周期 \rightarrow 光隙

$$\psi_k(r) = e^{i(k \cdot r)} u_k(r)$$

3. 写出或画出一种产生一维准周期 Fibonacci 链的方法。(一)

A \rightarrow AB B \rightarrow A



4. 简述一下 Landau 的二级相变理论和相变临界现象。(一)

对称性 序参量

临界点 (二级相变点), 长波尺度大波动

5. 写出极化子和激子的定义, 它们是怎样分类的? (一)

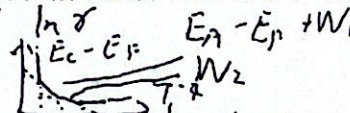


离子晶体, 存在空穴, 离子极化, 准粒子

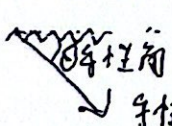
/ 电-空束缚对

6. 写出非晶半导体直流电导 (一种载流子) 的贡献组成并画出电导率与温度之间的关系示意图。

$$\sigma = \sigma_0 e^{-E/k_B T} + \sigma_1 e^{-E_1/k_B T} + \sigma_2 e^{-E_2/k_B T} \ln \sigma$$



7. 写出单壁纳米碳管的结构分类定义和管直径的计算公式? (考一)



$$C_h = n a_1 + m a_2$$

$n=m$ armchair
 $n \neq 0, m=0$ zigzag

其他 C_{hi} ; C_{hi} zig arm

$$0 \leq \theta \leq 60^\circ$$

$$d = 0.078 \sqrt{n^2 + m^2 + nm}$$

$$\theta = \arctan[\sqrt{3}m/(n+m)]$$

8. 什么是碳富勒烯团簇中的孤立五边形规则 (IPR)? 满足 IPR 规则的最小碳富勒烯团簇是什么? (考三)

不相邻 \rightarrow 稳定



9. 简述 STM 实验中 I-V, $dI/dV \sim V$ 和 $d^2I/dV^2 \sim V$ 谱测量了样品的什么物理量? (考二)

ρ 电子振功 (IEFS)

10. 简述整数量子霍尔效应和分数量子霍尔效应的差别和联系。(四)

量子化电阻 (Landau 能级)

量子霍尔电阻 $\frac{h}{e^2}$

验证量子力学

\rightarrow 非微扰量子化 分数与振数 $\nu = \frac{p}{q}$

开创了拓扑学

11. 写出一维体系中电荷密度波的表达式, 说明波长与何物理量有关? (四)

$$\rho(x) = n + n_c \cos(2\pi \frac{x}{\lambda} + \varphi)$$

入只决定于费米动量或电子密度, 与 a, q' 无关.

12. 简述金属凝胶模型及其结论. (五, 1)

电子
恒正电荷

自由电子气

13. 简述 Hubbard 模型和 Anderson 模型. (五) P256

H: 自旋相反电子占据同一轨道, 库仑作用 (电-电作用)

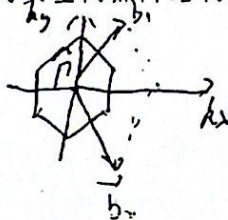
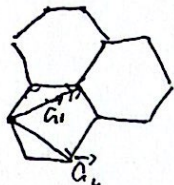
满带分裂
 $U > t$ 强关联
 $t \ll U$ 弱
绝缘

A: 杂质, $d-k$ 隧穿项做局域轨道的通过者.

14. 简述激光冷却和挥发冷却的基本原理. 激光的隧穿过程进行在极低温.

$\rightarrow \nu \quad eV$
动量 (特定能级吸收)

二、画出二维石墨单层 (graphene) 的实空间点阵结构和倒空间布里渊区. (各一)



2006 年高固试题 (部分答案)

一、概念题

1. 简述凝聚态物理的范式 (一)

对称性和对称破缺 有序相和基态, 无微扰, 相变和临界现象

广义刚度和软陷

2. 什么是准晶体, 三维准晶体的非晶体学对称点群是什么? (一)

长程有序, 准周期

M_{32} (唯一的三维准晶)

晶体学不允许的长程取向序

另: N_{mm}

3. 简述液晶显示器的原理. (一)

各向异性分子, 取向定向, 电压改变取向态 \rightarrow 偏振态

4. 相变是如何分类的, 什么是 K-T 相变?

热力学势 (自由能) n 阶微商不连续

二维 拓扑激发 自旋涡旋对 {低 高 有序无序 破坏 欠守恒}

5. 写出金属中电子相互作用的集中表现方式。

6. 描述激光打印机的工作原理。✓ (2)

吸鼓带电. 扫描曝光. 静电成像. 显色转印. 热压定影.

清洗吸鼓

7. 什么是介观体系? 给出介观体系的普适电导涨落的物理解释。(3) 多次散射.

$L_0 < L < L_y$

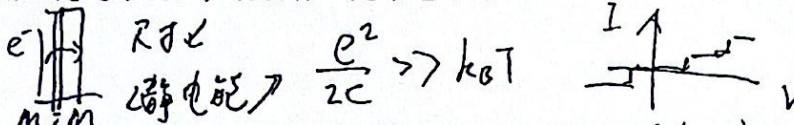
许多散射路径 几率幅之和 无规. 相位互不关联
 随机干涉. 无规涨落

8. 定性评述一下纳米体系的磁学性质。(3)

① 超顺磁. (各向异性能 < 热运动可比拟) ② > SPM 时. $H_c \uparrow$ 早晚.

③ 尺寸间距 < 交换耦合 < T_c < ④ 磁电效应

9. 用双隧道结模型, 说明什么是单电子库伦阻塞和库伦台阶效应?(3)



$\alpha = \frac{C}{T - T_c}$
 $\chi \propto k_B T$

10. 简述 STM 的 Tersoff-Hamann 模型的假设和结论。(2)

低偏压小偏压

针: 尖端
 隧道电流 $\propto L DOS$

11. 费米液体理论的适用条件是什么? 为什么它对一维体系不适用?(5)

确定费米面 大简并度 自旋 1/2 电子自旋子.
 准粒子寿命 晶体适用 和反自旋荷电且玻色子激发'

12. 写出整数霍尔效应的主要物理因素。✓ (4)

① Landau 能级

② 无序和局域 ③ 隐藏的狄拉克

13. 写出三种区分金属和绝缘体的方式。P298 (5)

① 能带论. gap.

② Anderson 无序. 局域 ③ Mott 绝缘 $\Delta \Delta$

14. 写出玻色子和费米子的量子统计的分布函数, 并简述什么是 BEC? ✓

$n^F(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E/k_B T} + 1}$ $n^B(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E/k_B T} - 1}$ 低温下. 同状态 $n!$ 倍. 实空间. 能量空间. 凝聚.

二. 定性论证无序体系的 Anderson 局域化 (Thouless 公式) (2) P183

N . V 有限. N/V 有限

某格点几率幅 $A(t) \neq 0$ (局域态) 强无序 $WN \gg 1$. 与相邻格点. 电子波函数混入.

三. 以铁磁体为例, 写出临界指数的定义和它们的标度律。(2)

$C_m(T, B=0) \propto (T - T_c)^{\alpha} (T \rightarrow T_c + 0)$
 $C_m(T, B=0) \propto (T_c - T)^{\alpha'} (T \rightarrow T_c - 0)$
 $M(T) \propto \beta$ 关联长度 $\xi(T) \propto \nu$

主导项 $\frac{2ZV}{E_i - E_j} < 1$. 快自旋进动.
 标度律: $\nu, \alpha, \alpha', \nu$ 元组起伏.

第一章 概論

1. 凝聚态物理: 从微观角度出发, 研究由非相对论粒子系统组成的凝聚态物质(固体和液体)的统计动力学过程及其与宏观物理性质之间联系的学科。

02.2 范式: 将大作为样本或模大时例子

固体物理的范式: 核心概念: 周期性中的波动性; 晶体的平移对称性; 波矢空间; 强关联的; 电子以及波矢空间的色散关系

光子晶体: 在高折射率材料中某些位置周期性出现低折射率的材料, 这种光致折射率引起的周期性变化产生光带隙结构, 控制着光在晶体中的运动。

范式溶液: 是相干性, 主要体现在输运性质方面, 输运性质由载流子对散射中心的散射决定。

范式开拓(无序体系: 相对周期性晶体结构而言: 非晶、液晶、准晶、液体等; 以不是好导体)

介观体系: 体系尺度 \ll 非弹性散射的平均自由程

量子化学的范式: 核心思想: 实空间中的几何性; 电子的局域化; 高密度的中心和电荷的转移

和固体能带理论范式的差别: 一个子到周期性结构, 主要处理非局域态; 二个强关联相; 键合的形成, 主要处理局域态

和固体能带理论范式的联系: 分子轨道理论类似于紧束缚的单电子近似

价键理论核心理想: 电子的配对形成定域的化学键[原子轨道(或杂化轨道)的乘积]

分子轨道理论主要思想: 一个分子中的所有轨道都对每个分子; [反轨道的线性组合]

有效组成分子轨道的条件: 1. 能量相近条件; 2. 对称性匹配条件; 3. 最大重叠条件

(计算机模拟)

模拟的对象: 多粒子体系

模拟的问题: 有限温度(包括零温)下的结构和性质

模拟的基础: 有效势(势函数), 形式: 经验势(对势, 多体势); 紧束缚势; 第一原理势

模拟技术: 能量极小值法; 分子动力学法; Monte-Carlo方法

凝聚态物理的范式: 核心概念: 对称破缺, 四个层次相关联: 基态, 元激发, 缺陷, 临界区域
(简单性和复杂性的关系: 基本定律在多粒子系统长时间的作用将给出有趣的非平衡现象)

1.1 对称性: 四类对称性: 空间粒子的互换; 连续时空变换; 分立变换; 规范变换

对称性都是植根于某些物理量是不可观测的假设, 不可观测者在的直接后果是存在守恒定律或选择定则, 相反, 一旦一个不可观测量变成可观测的, 对称性就破缺了

凝聚态物质世界有限对称破缺的例子

1.2 有序-无序相变是每体系的一般特征 $F = U - TS$

高温时, T 的初小值与最大熵值有关, 倾向于无序态; 低温下, T 的初小值与优势, 平衡态由内能初小决定, 系统处在有序态

基态: 通常作为一个系统的最低能量态, 它具有某种对称性, 下列同利

四. 写出密度泛函数理论的两个基本定理, 并证明第一定理。(五)

① $E_0 = E_0(\rho_0)$ 反证法: $\rho_0 \langle \frac{E_0 - q}{C_0 - b} \rangle$ 均不同, ϕ 不同. $E_{0,a} + E_{0,b} \neq \langle E_{0,b} + E_{0,a} \rangle$

② $E_0 \leq E_0(\rho_0)$

2003 年高固试题(部分答案)

一、概念题

1. 晶体材料中的电子能带与光子晶体中的光子能带形成的物理原因是什么? (一)

布拉格 同相耦合
矢 同相折射率

2. 结合范式谈谈元激发概念在物理学中的重要性; 举出 4-5 种元激发类型。(一)

复杂多体 \rightarrow 简单准粒子.

3. 相变是怎么分类的? 举出几种你知道的一级和二级相变的物理例子. K-T 相变是几级? (06年, 4)

玻色子, 费米子, 声子, 孤子, 等离激元

4. 相变中的重整化群理论是研究几级相变的? 它与 Landau 相变理论分别适用于什么温度区间? 物理

原因是什么? $\left\{ \begin{array}{l} \text{重整} \\ \text{Landau} \end{array} \right. T_c \text{ 降低, } \xi \rightarrow \infty \text{ 标度不变性 配分函数形式不变. } T_c \text{ 序参量, 对称性破缺}$

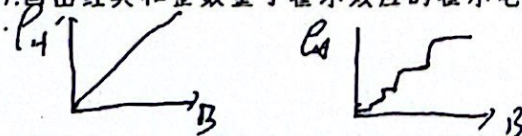
5. 介观是如何定义的? 列出你所知道的在介观体系中的基本物理效应. (06, 7) (三)

$l_c \ll l \ll l_y$ 普适导电涨落, 非定域电导, 正常金属环持续电流, Aharonov-Bohm 效应.

6. 写出你所知道的纳米体系的基本物理效应并解释其中的一种效应。(三)

小尺寸, 表面, 量子尺寸 库珀阻塞, 宏观量子隧道, 介电限域.

7. 画出经典和整数量子霍尔效应的霍尔电阻和磁场的草图。



8. 简述决定原子团簇结构的两种序及某些团簇出现幻数现象的物理原因。

位置序, $T > T_c \approx \frac{h^2}{3mk_B a^2}$ $\lambda > a$
动量序, $T < T_c$ $\lambda < a$.

9. 简述扫描隧道显微镜 (STM) 的工作原理。

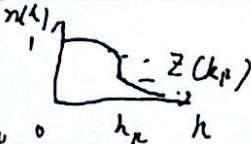
隧道电流 $I \propto \rho$ 密度. 恒流恒高模式.

10. 波在无序体系中传播有什么特征? 无序体系中弱定域化效应的主要物理原因是什么? (三) ρ_{ij}

平均自由程 λ . ① 弹射. 相位有确定改变 ② 波函数干涉. 电子平均.

11. 正常费米液体存在的要素是什么? 画出零温占据率 $n(k)$ 与波矢 k 的草图.

① 可明确定义费米面.



② 准粒子寿命.

12. 简述密度泛函理论的理论基础.

① Thomas-Fermi-Dieckmann Model ② Hohenberg-Kohn Theorem ③ Variational

13. 非晶半导体中载流子变程跃迁与定程跃迁分别对应什么温区? 写出变程跃迁中电导随温度变化的

低 高.

关系.

$$\sigma \propto e^{-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{d+1}}$$

(d 是维数)

14. 写出单壁纳米碳管的结构分类, 并给出它们呈现金属性的条件. (三)

arm
zig
chi

$$\frac{n-m}{3} = \text{integer}$$

二、在金属中电子平均自由程的下限为原子间距的假定下 (三)

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$$

(A) 算出二维金属的最小电导率

结果 $k_F e^2 l$

$$\Rightarrow \sigma_0 = \pi k_F l \quad (\sigma_0 = \frac{e^2}{2\pi^2 l})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} n = \frac{k_F^2}{2\pi} \\ h = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \end{array} \right. \Rightarrow v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$$

$$N = n \cdot V = \frac{2 \cdot \pi k_F^3}{(2\pi)^3} \Rightarrow n = \dots$$

(B) 算出三维金属的最小电导率

$$N = n \cdot a^3 = \frac{4}{3} \pi k_F^3 \cdot \frac{a^3}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2} a^3$$

$$v_d = \frac{e \cdot E \tau}{m} = \frac{e E a}{m v_d} \Rightarrow \frac{k_F^2 e^2 l}{3\pi^2 a}$$

三、已知某实验用 N 个质量为 m 的相同的原子在受控区间的体积为 $V (=L^3)$, 实现了玻色-爱因斯坦凝聚.

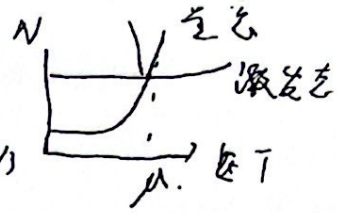
(三)

(A) 给出在什么温度下, 原子显示出量子效应. (用已知参量给出表达公式).

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \Rightarrow T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B \lambda^2}$$

(B) 给出在什么温度下，体系才会出现玻色-爱因斯坦凝聚。

~~$\lambda_{B-T} = \lambda_{B-T}^0 \left(\frac{N}{C(3)} \right)^{1/3}$~~ $\lambda_{B-T} = \lambda_{B-T}^0 \left(\frac{N}{C(3)} \right)^{1/3}$



四. 试给出多粒子体系在低温下成为有序相的一个简单理论推导。

(五) 费米液体.

$E_k \sim \dots \propto k^2$

$E_p \sim \dots \propto k^{1/3}$

$T \propto n \downarrow$

$E_p \gg E_k$

2002 年高固试题

一、概念题

1. 固体物理、量子化学和凝聚态物理的范式核心内容是什么? \checkmark (-) (06.1)

周期势场, 平移对称, 费米电子, 波矢空间巨数.

实空间几何结构, 电子局域化, 电子密度分布和电荷有序.

2. 什么是元激发? 写出你所知的元激发的名称和激发类型. (03.2) (-)

有相互作用多体 \rightarrow 基本激发单元集合, 有确定能量, 有时还有确定动量

3. 相变是如何分类的? 什么是 K-T 相变? (06.4, 03.3)

软力与硬力, 二粒, 无序相对长程序破坏, 导致连续相变, 体系

4. 什么是相变临界现象? 叙述重整化群研究相变临界现象的基本物理思想. (-)

1. 物质处在某接近临界点, 特殊行为.

关联长度 $\xi \rightarrow \infty \rightarrow$ 标度不变性, 临界指数标度律 (普适性)

临界点 \leftrightarrow 非线性变换不动点, 研究配分函数开式不变的变换, 寻找不动点附近线性化标度律, 计算临界指数

5. 无序固体的最重要特征是什么? 什么是迁移率边?

引入缺陷破坏周期性, 引起局域化, 无序体系的特征 (扩展 \rightarrow 局域), 局域带尾



6. 简述无序体系直流电导的变程跳跃和定程跳跃控制区.

局域态

低温

高温

如跳跃电导

能量差

如波函数重叠主导

7. 固体中的电子弹性散射和非弹性散射是如何区别的, 怎么通过它们定义介观体系?

电子

弹性 / 非弹性 散射中心

$l_e \ll l_p$

无能量交换

$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_1} \Rightarrow l_0 = v_F \tau_0$

→ ② →

物理解释(06.7)

8. 简述介观体系的 AB 效应, 普适电导涨落。(2)

AB 效应 → ②

特征: ① 与时间无关, 非热噪声 ② sample-specific, pattern 可重复

A 使修正数相位周期变化

③ 涨落大小, e^2/h 量级 普适

9. 列出你所知的纳米体系的基本物理效应。

(03.6)

10. 简述扫描隧道显微镜 (STM) 的工作原理。(03.5)

11. 简述经典和整数量子霍尔效应。(综合 07.10)(03.7)

12. 简述密度泛函理论的理论基础。(03.12)

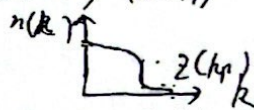
低维 两关联作用

费米液体: $E_k \propto \eta^{\nu} \gg E_p \propto \eta^{\nu}$ 自由电子. n 很大时 n 相对 $E_p \gg E_k$ 费米液体.

13. 什么是费米液体, 称为费米液体的条件是什么? (03.11)(06.11)

电子 → 准粒子 (胡道)

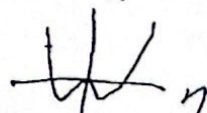
费米液体 费米液体



14. 写出玻色-爱因斯坦及费米-狄拉克量子统计的分布函数, 简述什么是玻色-爱因斯坦凝聚。(06.14)

二、写出序参量为矢量的 Landau 二级相变理论, 画出自由能-序参量的关系示意图。(一)

$$F(\tau, \eta) = F_0(\tau) + \alpha_2(\tau) |\eta|^2 + \alpha_4(\tau) |\eta|^4 + \dots$$



三、对于三维自由电子气体: (1) 试求电子密度 n 与费米波矢 k_F 的关系; (2) 求出能态密度 $g(E)$

$$n \cdot L^3 = 2 \cdot \frac{4\pi k_F^3}{(2\pi)^3}$$

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

与 E 的关系; (3) $T=0K$ 时, 求费米能量及每个电子的平均能量。(固体物理)

四、写出三种有关金属和绝缘体的区分方法以及金属-绝缘体转变的机制。(6.13) P298.

1. 写出空间平移、时间平移、空间反演、时间反演和空间旋转不变性在物理学中所对应的不可观测

绝对定 时 左右 电荷 空间方向.

动 能 守恒 电荷守恒 角动量
量和守恒量。

2. 简述金属电子相互作用的集中典型表现形式。(06.5)

3. 什么是广义刚度? 列举三种这样的物理量。(一)

有序相 (E 减小) + 缺陷破坏 \rightarrow 声子响应, 反映长程上电子关联

4. X 射线吸收谱包含哪两个部分? 它们能提供哪些信息?

EXAFS XAFS
扩展力 近边.

5. 简述什么是 Anderson 局域化和 Anderson 相变? (二)

(06.2)

无序引起 E 产生局域 \rightarrow 绝缘.

6. 定性说明金属和半导体电阻随温度变化的一般规律。



$$\rho = \frac{e^2}{k} \frac{T}{1-T} \quad \text{得 } T \rightarrow 1, \rho \rightarrow \infty$$

7. 什么是介观体系, 写出单通道 Landauer Buttiker 公式

$l \ll l < l_y$
弹. 相位.

$$g_c = \frac{e^2}{h} T \quad \frac{1}{g_c} = \frac{1}{g} + \frac{h}{e^2}$$

两动量

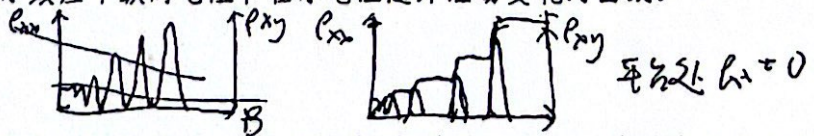
8. 定性描述一下纳米体系的磁学性质。(06.8) \rightarrow 包含了接触电阻

9. 如何确定一个原子团簇的结构是由位置序还是由动量序决定?

(玻色 BEC) $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m}} \quad \lambda = \frac{h}{p_{12}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2m \cdot \frac{1}{2} k_B T}} = \frac{h}{\sqrt{3m k_B T}}$

$\lambda \sim a$ (原子半径) $\Rightarrow T_0 \equiv \frac{h^2}{2m k_B a^2}$

10. 定性画出量子霍尔效应中纵向电阻和霍尔电阻随外磁场变化的曲线。



11. 推导出一维周期体系 (周期为 a, 电子密度为 n) 发生 Peierls 相变的电荷密度波的波长公式。(08)

$$\rho(x) = n + n_c \cos(2\pi \frac{x}{\lambda} + \varphi)$$

布里渊区 $k_n' = \frac{1}{2a}$

Peierls 不稳定 $k_n' = k_n$. 1-级衍射 $n \cdot a' = \frac{2 \cdot 2k_f}{1} = 4a' k_f$

我操 (考虑空穴空穴) / into a fraction of Hartree-Fock. 复 @ @ @ LDA.

12. 说出 LDA, GGA, meta-GGA, LDA+U, Hybrid DFT 的定义 (证)

局域空穴近似

Kohn-Sham kinetic-energy density (动能空穴证)

Hubbard 电荷相互作用势

13. 简述费米空穴, 库仑空穴的物理含义 (证)

交换作用

库仑作用

自旋相同轨道电子密度空穴

14. 写出简单 Hubbard 模型的 Hamilton 量并以此说明 Mott-hubbard 相变。

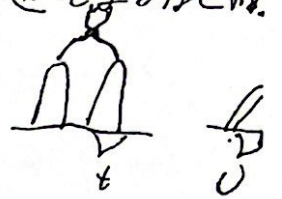
各粒子, 同轨道电子二次量子化.

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

只考虑处于同轨道电子相互作用 U

二、简述 STM 工作原理并定性讨论 I-V, dI/dV-V, d²I/dV²-V 谱测量样品的什么性质。

(07.9) (03.9)



Zigzag 和 armchair 碳纳米管的导电性。

$$\frac{n-m}{3} = \text{integer}$$

(n, 0)

$$\frac{n-m}{3} \geq 0$$

金属 2/3 半导体

三、用 TB 考虑最近邻碳原子的 π 电子的相互作用并讨论。

量子阱!

2.7 eV.

四、推导出 Bose 和 Fermi 量子统计的分布函数 (证)

$$n^B(\epsilon) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\epsilon/kT} - 1}$$

$$n^F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\epsilon/kT} + 1}$$

写出空间平移、时间平移、空间反演、时间反演和空间旋转不变性在物理学中所对应的不可观测量和守恒量

② 简述金属电子组态作用的几种典型表现形式

③ 什么是定义刚度：列举三种这样的物理量

④ 双量子点及双量子点包含两个量子点，它们能提供哪些信息

⑤ 简述什么是Anderson局域化和Anderson相变

⑥ 定性说明金属和半导体电阻随温度变化一般规律

⑦ 什么是介观体系，列举通道 Landau-Buttiker公式

⑧ 定性描述一下纳米体系的弦性质

⑨ 如何确定一个原子团簇的结构是由位置序还是由能量序决定

⑩ 定性画出量子霍尔效应中纵向电阻和霍尔电阻随外加磁场变化的曲线

⑪ 推导出一维周期体系（周期为a，电子质量为m）发生Peierls相变的电荷密度波的波矢公式：
$$\lambda = \frac{1}{2ka} = \frac{2}{\pi} \times a \text{ 元类, } \lambda \text{ 为 } \frac{1}{2} \text{ 量子化波矢}$$

⑫ 简述STM工作原理并定性讨论 I-V, dI/dV-V 和 d²I/dV²-V 谱测量样品的什么性质

Zigzag和Armchair 碳纳米管的导电性

最近邻C原子的P_z电子的相互作用并讨论

⑬ 简述平面波和Fermi量子统计分布函数

⑭ 说出LDA, GGA, meta-GGA, LDA+U, Hybrid, DFT的定义

⑮ 简述费米空穴和空穴的物理含义

⑯ 写出简单Hubbard模型的Hamilton量并以此说明Mott-Hubbard相变

Chap 5.13

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi = E \psi$$

对于Armchair纳米管来说 N=3M-1 金属否则为半导体

Zigzag 总是金属 N越大Fermi面与p_z轨道越近 金属

对于Armchair与zigzag混合的条带总是金属性 siok

Armchair GMR-PM zigzag: AFM

1. 用标量势函数表述阿物位式

2. 简介光子晶体 准晶 液晶

3. 相变级数定义: K-T 相变是什么

4. 简单金属中电子相互作用的表现方式

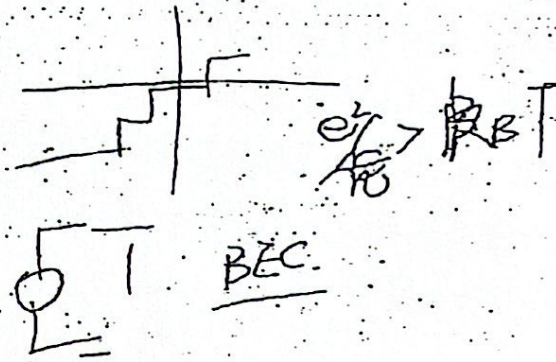
5. 画出对称破缺的多粒子集体态的能态示意图

6. 强无序体系中电子态的特征是什么? 高T 低T 直流电导的机制有何不同

7. AFM 之作模种类 各别处于什么力范围

8. 稳定性效应和 UCF

9. QHE, 下库仑阻塞和库仑台阶



10. BEC

11. 三种金属-绝缘体

12. DFT 的两基本定理

13. Peierls 不稳定性

14. 费米液体及存在条件及理论

15. 用 RG 证明一维 Ising 模型在有限 T 变化下不存在相变

三. 计算 (5,5), (10,10) 碳管的直径和原胞中的原子数及电导率

四. 推导 Bose 的量子力学统计

$$(n, m) \quad m-n=3q \quad (q \text{ 为整数})$$

$$d = 0.078 (m^2 + nm + n^2)^{1/2}$$

$$\theta = \pi c \tan[\sqrt{3}m / (m + 2n)]$$

2002 高等固体物理期末考试试题

一、概念题 (每题5分)

√ 固体物理、量子化学和凝聚态物理的范畴核心内容是什么?

03.01 / 什么是元激发? 写出你所知道的元激发的名称及激发类型。

03.02 / 相变是如何分类的? 什么是K-T相变?

03.04 / 什么是相变临界现象? 简述重整化群方法研究相变临界现象的基本物理思想。

√ 金属固体的最重要特征是什么? 什么是迁移率?

03.06 / 简述金属直流电导的弛豫与跳跃和定程跳跃机制。

03.07 / 固体中的电子弹性散射和非弹性散射是如何区别的, 如何通过它们定义介观体系?

03.08 / 简述介观体系中的AB效应, 普适电导振荡。

03.09 / 列出你所知道的两个体系的基本物理效应。

03.10 / 简述扫描隧道显微镜 (STM) 的工作原理?

03.11 / 简述经典示量占化霍尔效应

03.12 / 简述费米能级理论的理论基础

03.13 / 什么是超导体, 成为超导体的条件是什么? $T > T_c$

03.14 / 写出玻色爱因斯坦凝聚是一级相变还是二级相变并给出理由。简述玻色爱因斯坦凝聚。



√ 写出原量为矢量的Landau二级相变理论, 写出自由能-序参量的关系示意图。(10分)

√ 对于三维自由电子气, (1) 试求电子密度 n 与费米波矢 k_F 的关系 (2) 求费米能级 E_F 与 n 的关系 (3) $T=0K$ 时, 求费米能级与平均电子的动能 \bar{E} 的关系。(10分)

√ 写出三种有关金属和绝缘体的区别, 以及金属-绝缘体转变的机制。(10分)

金属
Mott
Anderson

1. 固体物理，量子化学和凝聚态物理的范式核心内容是什么？ [02] $L_0 = 10^{-10} m$ $L = 10^{-9} m$
2. 用标量特量表示固体物理范式 [07] 凝聚态物理的范式？ [06] $L < 10^{-9} m$
3. 简要介绍光子晶体，准晶和液晶 [07] $L > L_0$ 光子晶体 $L < L_0$ 液晶
4. 晶体材料的电子能带和光子晶体中的光子能带形成的物理原因是什么？ [03] 不需掺杂
5. 三维准晶体的非晶体学对称点群是什么？ [06] 20 面体型 $L_1 < L < L_0$ 准晶
6. 简述液晶显示器的原理 [06]
7. 描述激光打印机的工作原理 [06]
8. 什么是元激发，写出你知道的元激发的名称和激发类型？ [02] 谈谈元激发在物理中的重要性，并举例 [03] 02 部分 $-T_2$
9. 相变如何分类；相变级数的定义？举出一级二级的例子？ [03] 什么是 K-T 相变？是几级？ [02] $-T_4$ T_3 P_{209}, P_{210}
10. 列举金属中电子相互作用的集中表达方式？ [07] [06]
11. 什么是相变临界现象？叙述重整化群方法研究相变临界现象的基本物理思想？ [02] 该方法研究的是几级相变？他和朗道相变分别适用于什么温度区间？物理原因是什么？ [03] P_{112-1} P_{115-16}
12. 无序固体最重要的特征是什么？什么是迁移率边？ [02] P_{123} P_{181}
13. 简述弱定域效应和 $U < V$ ？ [06] P_{195}
14. 简述无序固体直流电导的变程和定程跳跃的机制？ [02] P_{211}
15. 非晶体中的载流子和定程和变程跃迁分别对应什么温区？写出变程跃迁中的电导随温度变化的关系 [03] P_{210} (P_{117}, T_2)
16. 强无序固体中电子态的特征是什么？高 T 低 T 下的直流电导和机制有何不同？ [07] P_{197}
17. 固体中电子弹性散射和非弹性散射是如何区别的？怎么通过他们定义介观体系？ [02] P_{206} $U < V$
18. 简述什么是介观体系？ [06] 简述介观体系中 AB 效应和普适电导涨落？ [02] P_{211}
19. 简述 QHE，库伦阻塞和库伦台阶？ [07] 用双隧道结模型，说明什么是单电子库伦阻塞和库伦台阶效应 [06] P_{210} P_{211} L_{209} $L < L_0$
20. 列出你所知道的纳米体系的基本物理效应？并解释一种 [02] 定性的评价纳米体系的磁学性质 [06] P_{117} P_{37}
21. 简述 PT 的两个基本定理 [07] D $F T$ 定理 PT 理论
22. 简述 peierls 不稳定性 [07] P_{126}
23. 简述扫描隧道显微镜 STM 的工作原理 [02] 简述 STM 的 Tersoff-Haman 模型的假设和结

论? [06]

24. AFM 工作的模式的种类, 分别处于什么力的范围? [07]

25. 简述经典和量子化霍尔效应? [02] 写出整数霍尔效应的主要物理因素 [06] 画出经典和整数霍尔效应的霍尔电阻和磁场的草图 [03]

26. 简述决定原子团簇结构的两种序及某些团簇出现幻数现象的物理原因 [03]

27. 简述密度泛函理论的理论基础? [02] 写出该理论的两个基本定理, 并证明第一定理 [06]

28. 什么是费米液体? 成为费米液体的条件是什么? [02] 画出零温占据率 $n(k)$ 和波矢 k 的草图 [03] 费米液体理论适用条件是什么, 为什么它对一维体系不适用 06

29. 写出波色-爱因斯坦及费米-狄拉克量子统计的分布函数? [02] 简述什么是波色-爱因斯坦凝聚 BEC [07]? [06] 玻色子和费米子的量子统计分布函数

高分题

1. 写出序参量是矢量的朗道二级相变理论, 画出自由能-序参量的关系示意图? [02]

2. 对于三维的自由电子气体, (1) 试求电子密度 n 和费米波矢 K_F 的关系 (2) 求出能态密度 $g(\epsilon)$ 和 ϵ 的关系 (3) $T=0$ 求费米能量及每个电子的平均能量 [02]

3. 写出三种绝缘体和金属的区分, 以及金属-绝缘体转变的机制 [020607]

4. 用 RG 证明以为 Ising 模型在有限温度 T 变化下不存在相变? ~~(不要答)~~ [07] !!

5. 计算 (5, 5) (0, 10) CNT 的直径和原胞中的导电性 [07] 写出单壁 CNT 的结构分类, 给出成金属性的条件? [03]

$$d = \frac{\sqrt{3}}{n} a_{cc} \sqrt{m^2 + mn + n^2}$$

6. 推导 Bose 的量子力学统计 [07]

$$\theta = a_{cc} \epsilon_g \frac{\sqrt{3} m}{m T \lambda_{th}}$$

7. 定性论证无序体系的 Anderson 局域化 (Thouless 公式) [06]

8. 以铁磁体为例, 写出临界指数的定义和他们的标度律 [06]

9. 写出密度泛函理论的两个基本定理, 并证明第一定理 [06]

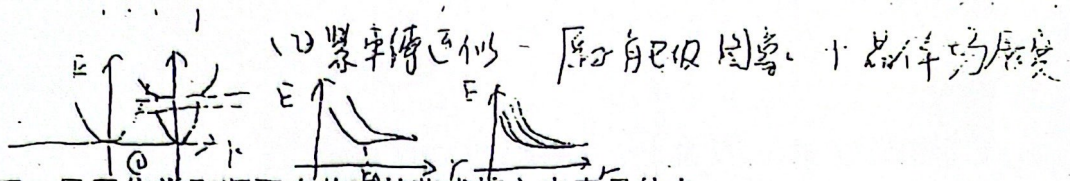
10. 试着给出多粒子在低温下成为有序相的一个简单理论推导 [03] ppt 9

11. 在金属中电子平均自由程的下限是原子间距条件下, 算二, 三维金属最小的导电率 [03]

12. 已知实验用 N 个质量为 m 相同的原子在受控区体积为 $V(=L^3)$ 实现了 BEC. 1 在什么温度下原子显出量子效应? (用以知参量给出表达式) 2 在什么温度下体系才会出现 BEC

(同上) 03

13. 第9章已存习题一



1 固体物理, 量子化学和凝聚态物理的范式核心内容是什么

范氏: 作为样本或模式的例子

固体物理的范式核心: 周期结构中的波的传播, 晶体的平移对称性, 波矢空间(倒空间), 强调共有化的价电子以及波矢空间的色散关系

量子化学的范式核心: 实空间的几何位形; 电子局域化; 电子密度的集中和电荷转移

与固体物理的区别是一个强调周期结构主要处理非局域态, 一个强调原子相关, 键合的形成主要处理局域态,

凝聚态物理的范式核心: 对称破缺-基态; 元激发; 缺陷和临界区域(四个层次相互关联)简单性和复杂性的关系: 基本定律在多粒子体系上长时间作用将给出有趣的结构和事件

定义: 从微观角度出发, 研究相互作用多粒子体系组成的凝聚态物质(固液)的结构动力学过程及其与宏观物理性质之间关系的一门学科。

四种对称性-全同粒子互换, 连续时空变换, 分立变换, 规范变换对称性

2 用标量定量表示固体物理范式

$$\left(\frac{1}{2} \nabla^2 + V(r)\right) \chi(r) = E \chi(r)$$

$$\chi(r) = V(r + R_n)$$

标量波——在绝热近似, 单电子近似下, 电子在周期场中的运动方程

布洛赫定理 $\chi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r)$, $u_k(r) = u_k(r + R_n)$, $E_k(k + G_n) = E_k(k)$

3 简要介绍光子晶体, 准晶, 液晶

光子晶体——在高折射率材料的某些位置周期性的出现低折射率的材料。这种光的折射率指数的周期性变化产生了光带隙结构, 控制着光在晶体中的运动。

准晶是固态物质的一种新的有序相, 同时具有长程准周期平移序和晶体上不允许的长程取向对称。液晶: 凡是具有各向异性的液态, 由各向异性分子组成, 且分子倾向定向排列的物质。

简述液晶显示器的原理[06]

液晶: 凡是具有各向异性的液态, 由各向异性分子组成, 且分子倾向定向排列的物质。

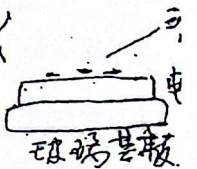
液晶的分类: 向列型液晶长宽约 1mm-10mm, 进晶型液晶, 螺旋状液晶。

液晶分子形状: 长棒型, 盘型, 碗型, 聚合物。

液晶层中的液晶包含在细小的单元格结构中。一个或多个单元格构成屏幕上的一个像素。在玻璃基板与液晶材料之间是透明的电极, 电极分为行和列。在行和列的交叉点上。通过改变电压而改变液晶分子的旋转状态。液晶材料的作用类似一个小光阀。

在不加电场时, 光线通过一块偏振片变为平行于基板上液晶取向的偏振光。偏振光被液晶层旋转 90 度正好与下基板偏振光的光轴平行。这时光线可以透过。显示屏处在亮的状态:

当加上电场时液晶分子将沿电场方向排列。原来扭曲排列变为垂直平行排列。偏振光与垂直排列的液晶层不作用。光到达出射端的偏振片时, 偏光轴与出射光的偏振方向垂直。光线被挡住无法通过。这时显示屏呈暗状。如果所加电场不是很强。液晶分子就会处在半旋转状态。这时光线就只有部分通过偏光板。显



示屏就会出现明与暗之间的中间状态。

根据以上特点，液晶分子会做规则旋转 90 度排列，产生透光度的差别。我们就可通过加不同强度的电场，以改变液晶分子旋转的不同程度，来改变通过光线的强弱。最终实现各点不同亮度的图像来，这是单色液晶显示屏的工作原理。依此原理控制每个像素，便可构成所需图像。并且它很小，自身不发光，是利用外部的光线来形成像。

描述激光打印机的工作原理[06]

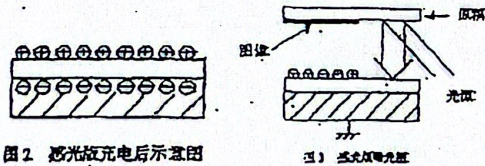
有些材料在遇到光的时候，化学性质不发生变化，而电学性质发生了变化。从绝缘体变为具有一定导电能力的导体。当它从新回到黑暗中的时候它从导体又变回绝缘体。这就是通常说的光电导现象，可以用下面的式子表示绝缘体+光子=导体。诸如 Se 和 CdS As₂Se₃ 等，对其施加一个电场，光照部分和未光照部分通过的电流会有很大的差异。

激光打印机就是利用这些材料的光电导特性，将其制成类似于普通照相用的感光板或底片，利用静电高压电晕放电使感光板表面沉积一定量的电荷，通过脉冲电压控制打印信息投射到感光板上，在感光板表面就会形成一个肉眼看不见的静电电荷图像(潜像)，再通过显影，将静电电荷图像变成肉眼可以看见的色剂图像并输出⁽¹⁾。

复印机的工作原理

过程是充电-曝光-显影-转印和分离最核心的是光导电材料的选择，利用非晶体硫系玻璃(硫系半导体) As₂Se₃ 光导电性作为复印机感光膜(感光鼓)。这类材料在性质上属于半导体材料，但又象玻璃一样是非晶态。

静电复印机的核心部分是感光鼓。感光鼓表面涂有光敏半导体材料，鼓表面平时不具备感光特性在进行复印时，通过电晕对其表面均匀进行高压充电，使其表面带有电荷。一般硒感光鼓表面充以正电荷，当有光照到感光鼓表面时，表面电荷消失，这一过程为感光鼓的充电。复印时，曝光灯照射在原稿区域范围内的影像通过反光镜照射到已充电的感光鼓上，根据白底与黑字对影像光的反射强度不同，白色部分反射光线强、鼓表面相应区域电荷消失，黑色部分反射光线较弱，电荷仍保留在鼓表面，这样就在感光鼓表面形成了和原稿相同的一幅静电潜在图



像，这为图像曝光。

图2 感光鼓充电后示意图

图3 感光鼓曝光

111 强无序固体中电子态的特征是什么？高 T 低 T 下的直流电导和机制有何不同？
[07]

无序足够强的时候，波函数可以是定域的。波函数的包络随距中心的距离的增加指数衰减，即 $|\phi(r)| = \exp(-|r-r_0|/\xi)$ 其中的 ξ 为定域化长度。

当体系的尺寸远大于定域化长度，体系处于强定域区。许多的电子态为定域态，

$\begin{cases} L \gg \xi & \text{强有序(长域)} \\ \xi > L > \xi_c > 0 & \text{弱有序(长域)} \end{cases}$

一维体系为什么不用

一维体系的低能激发不是自旋 $\frac{1}{2}$ ，而是 $\frac{1}{2}$ 的自旋子，而是具有电荷，自旋密度波动是集体激发。作为物理性质与费米的物理性质上的偏差称为非费米液体行为。

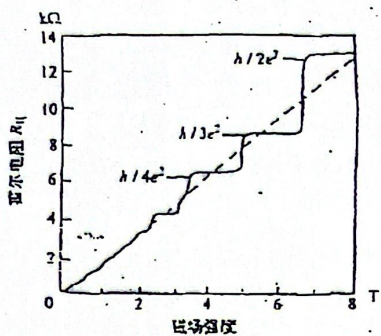
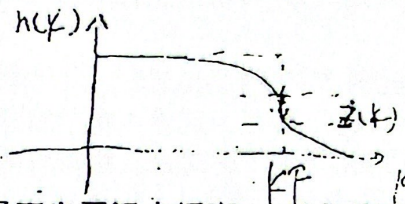


图1 处在磁场中的典型二维电子系统，温度为 50mK 时的霍尔电阻曲线，虚线表示与此对照的经典情况。



什么是费米液体？成为费米液体的条件是什么？[02] 画出零温占据率 $n(k)$ 和波矢 k 的草图 [03]

对于金属中的电子系统，在高密度下，电子动能为主，电子自由气模型是很好的近似。在低密度下，电子之间的势能或者关联变得越来越重要，电子可能因为这种关联作用进入液相甚至晶相。较强关联下电子系统被称为费米液体。

适用条件 (1) 必须有可明确定义的费米面存在 (2) 准粒子有足够长的寿命

确定费米体系是不是费米液体的唯一方法对费米面和准粒子寿命以及各种物理性质实验测量，看看是否与朗道理论一致。

费米液体 $T_F = \frac{1}{k_B} \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega$ 写作 $T_F = \frac{\hbar \omega_F}{k_B} = \frac{\hbar \omega_F}{2m v_F}$ 费米温度 ω_F 是费米波矢 ω_F 与费米速度 v_F 的乘积

写出波色-爱因斯坦及费米-狄拉克量子统计的分布函数？[02] 简述什么是波色-爱因斯坦凝聚 BEC [07]？

对于波色子：
$$n^B(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E/kT} - 1}$$
 其中 $e^{-\alpha(T)} = \frac{n}{n+1} e^{-E/kT}$ 。 α 是粒子数和温度有关的量，且与能级密度有关

对于费米子：
$$n^F(E) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{E/kT} + 1}$$
 其中 $e^{-\alpha(T)} = \frac{n}{1-n} e^{-E/kT}$

对于带有质量的量子波色子粒子，在温度很高的时候，他们的行为像普通的气体；当温度很低的时候，他们会在最低的量子态聚集起来，这种现象叫 BEC。这是由于波色子交换不变性和分布函数决定的。

经典分布函数玻尔兹曼分布 $N = N_0 e^{-E/kT}$

无序固体最重要的特征是什么？什么是迁移率边？

无序固体最重要的特征就是定域态的存在。

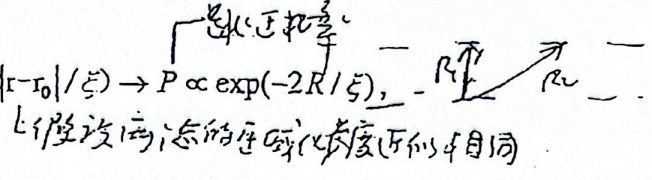
无序体系即存在扩展态也存在局域态，扩展态在 TBA 能量中心，局域态在带尾，并有一个划分局域态和扩展态的能量的分界称之为迁移率边。Ec 或者 Ev 是将分开的能量；费米面在扩展态区时有非零的电导，在局域态在零度电导率为 0。莫特把 EcEv 称迁移率边。

应用：
 (1) 迁移率边 (作用) 不可预言
 (2) 局域态是定域态，扩展态是扩展态
 (3) 费米面在扩展态区时有非零电导，在局域态区时电导率为 0
 (4) 迁移率边 EcEv
 (5) 迁移率边

相邻的定域态间的能量可能十分不同。当温度 T 趋近零，体系的电导率 $\sigma=0$ 为绝缘体，温度升高时，电子可因为热激活，从一个定域位置跳到另一个，产生跳跃电导。

$R_i, \epsilon_i \rightarrow R_j, \epsilon_j$ 电子从 i 遂穿 j 由两个因素决定

(1) 两个态的波函数的交叠 $\varphi \propto |\varphi(r)| = \exp(-|r-r_0|/\xi) \rightarrow P \propto \exp(-2R/\xi)$



$$R = |R_i - R_j|$$

(2) 两个格点的能量差 $\Delta\epsilon = \epsilon_j - \epsilon_i$; $P \propto \exp(-\Delta\epsilon/KT)$ 由有能量差在跳跃过程中声子被吸收或发射在固体世界中由玻尔兹曼因子 $\exp(-\frac{\Delta\epsilon}{k_B T})$ 决定。

所以 $P \propto \exp(-2R/\xi - \Delta\epsilon/KT)$

$T < T_0$ 在低温下格点间的能量差 (2) 比波函数的交叠 (1) 重要， \rightarrow 变程跳跃 (T₀ 由选择自量相近)

$T > T_0$ 在高温下波函数的交叠 (1) 比格点间的能量差 (2) 重要 \rightarrow 定程跳跃

3. 简述什么是介观体系? [06] 简述介观体系中 AB 效应和普适电导涨落? [02]

普适电导涨落的物理机制——从物理上看，普适电导涨落源于介观金属中的量子干涉效应。根据朗道理论，电导正比于总的透射几率。从样品的一边到另一边的透射几率幅是许许多多通过样品的费曼路径的相应的几率幅之和，在金属区电子通过样品时，经历了多次与杂质的散射。其费曼路径是无规行走的准经典轨道，不同的费曼路径间的相位差是不规则的，导致随机干涉效应，使得电导呈现非周期的不规则涨落。

5. 简述经典和量子化霍尔效应? [02] 写出整数霍尔效应的主要物理因素 [06] 画出经典和整数霍尔效应的霍尔电阻和磁场的草图 [03]

经典霍尔效应——如图所示，一个平板导体上通有沿其长轴方向的电流 I ，板的厚度和宽度分别为 t 和 w ，磁场 B 垂直于平板，存在一个与电流垂直的横向电压其大小为 $V_H = IB/Nte$ ，并由此得出霍尔电阻为 $R_H = B/Nte = B/N_s e$ (B 与 R 是线性关系)

整数量子霍尔效应——1980年在低温和强磁场条件下发现的量子霍尔效应表明：量子霍尔电阻 R_H 仅与基本常数有关，在二维电子系统中的霍尔电阻 R_H 有一系列的平台。如图所示， R_H 可以准确地表示为 $R_H = h/j e^2$ ，上式中 h 是普朗克常数， e 是电子的基本电量，由于 j 是正整数 ($j=1,2,3,\dots$)，这项发现被称为整数量子霍尔效应。

霍尔效应要求：(1) 二维电子气 (2) 非常低的温度 $< 4K$ (3) 强磁场 $-10T$

分数量子霍尔效应——1982年崔琦等在 R_H-B 曲线上出现 $1/3, 2/3$ 等分数量子霍尔电阻平台。

相同 Fermi 能级处于能隙位置时 都有 ICHHE, FAHE 等
不同 Fermi 能级处于能隙位置时 都有

不同 ICHHE 来源于单粒子态在强磁场中的量子化 单粒子态在强场中量子化
FAHE 来源于多体关联效应
多体关联效应

2008年高固试题

1. 写出空间平移, 时间平移, 空间反演, 时间反演和空间旋转不变性在物理量中所对应的不可观测量和守恒量

2. 简述金属电子对光作用的几种典型表现模式

3. 什么是广义刚度? 列举三种这样的物理量

4. X射线吸收谱包含两个部分? 它们能提供哪些信息?

5. 简述什么是Anderson局域化和Anderson相变

6. 定性说明金属和半导体电阻随温度变化一般规律

7. 什么是介观体系, 写出单通道Landau-Büttiker公式

8. 定性描述一下纳米体系的奇异性质

9. 如何确定一个原子团簇的结构是由位置序还是由能量序决定?

10. 定性画出量子霍尔效应中纵向电阻和霍尔电阻随外磁场变化的曲线

11. 推导出二维周期体系(周期为 a , 电子质量为 m)发生Dirac相变的电荷密度波波矢公式

简述STM工作原理并定性讨论 $I-V$, $dI/dV-V$ 和 d^2I/dV^2-V 谱测量样品

的什么性质
振荡频率

Zigzag和Armchair碳纳米管的导电性

用TB考虑最近邻C原子的p电子的相互作用并讨论

推导出Bose和Fermi量子统计的分布函数

12. 说出LDA, GGA, meta-GGA, LDA+U, Hybrid DFT的定义

13. 简述费米空穴, 库仑空穴的物理含义

14. 写出简单Hubbard模型的Hamilton量并以此说明Mott-Hubbard相变

Armchair 纳米条带 如果 $N=3M+1$ 金属否则为半导体

Zigzag

总是金属 N 越大 Fermi 面与 PDOS 越小

对于 Armchair: zigzag 交替地有奇数, 偶数个位置

stick

2.6

1. 固体物理, 量子化学和凝聚态物理的范式核心内容是什么? [02] *固体物理 (1-100nm)*
2. 用量子力学表示固体物理范式[07] 凝聚态物理的范式? [06]. *固体物理 < 1nm*
3. 简要介绍光子晶体, 准晶和液晶[07] *光子晶体, 准晶, 液晶*
4. 晶体材料的电子能带和光子晶体中的光子能带形成的物理原因是什么? [03] *不需证明*
5. 三维准晶体的非晶体学对称点群是什么? [06] *20面体群 I_h*
6. 简述液晶显示器的原理[06]
7. 描述激光打印机的工作原理[06]
8. 什么是元激发, 写出你知道的元激发的名称和激发类型?[02]谈谈元激发在物理中的重要性, 并举例[03]
9. 相变如何分类; 相变级数的定义? 举出一级二级的例子? [03]什么是 K-T 相变? 是几级? [02] *解法 P259, P261*
10. 列举金属中电子相互作用的集中表达方式?[07][06] *解法*
11. 什么是相变临界现象? 叙述重整化群方法研究相变临界现象的基本物理思想? [02]该方法研究的是几级相变? 他和朗道相变分别适用于什么温度区间? 物理原因是什么? [03] *P12-1 PPT 75-76*
12. 无序固体最重要的特征是什么? 什么是迁移率边? [02] *P183 P181*
13. 简述弱定域效应和 UCF? *P195 P211*
14. 简述无序固体直流电导的变程和定程跳跃的机制? [02]
15. 非晶体中的载流子和定程和变程跃迁分别对应什么温区? 写出变程跃迁中的电导随温度变化的关系[03] *P30 (PPT) 非弹性散射*
16. 强无序固体中电子态的特征是什么? 高T低T下的直流电导和机制有何不同? [07] *P197*
17. 固体中电子弹性散射和非弹性散射是如何区别的? 怎么通过他们定义介观体系? [02] *P106*
18. 简述什么是介观体系? [06]简述介观体系中 AB 效应和普适电导涨落? [02] *UCF P211*
19. 简述 QHE, 库伦阻塞和库伦台阶? [07]用双隧道结模型, 说明什么是单电子库伦阻塞和库伦台阶效应[06] *量子 Hall 效应*
20. 列出你所知道的纳米体系的基本物理效应? 并解释一种[02]定性的评价纳米体系的磁学性质[06] *PPT: 37*
21. 简述 ~~费米~~ 的两个基本定理[07] *DFT 密度泛函理论*
22. 简述 peierls 不稳定性[07] *P185*
23. 简述扫描隧道显微镜 STM 的工作原理[02]简述 STM 的 Tersoff-Hamann 模型的假设和结

1. 简述凝聚态物理的范式

答: (1) 凝聚态物理范式的建立: 二级相变理论, 超导理论, 超流 HeII 理论和 Fermi 液体理论. 无序系统理论, 磁性杂质的电子理论, 软模相变理论, Josephson 效应, 超流 HeIII 的理论和电导的标度律; (2) 概念: 元激发, 序参数, 对称破缺, 广义刚度, 缺陷, 解析性与连续性以及重整化群等。其中范式的核心概念是对称破缺; (3) 四个层次, 相互关联: 基态, 元激发, 缺陷和临界区域; (4) 简单性和复杂性的关系: 基本定律在多粒子系统上长时间的作用将给出有趣的结构和事件。

2. 什么是准晶体, 三维准晶体的非晶体学对称点群是什么?

答: 准晶是固态物质的一种新的有序相, 同时具有长程准周期平移序和晶体学上不允许的长程取向对称。不同取向对称轴之间存在着组合规律, 对于可能的点群产生制约。在两个以上方向具有非晶体学对称轴的点群只可能是 20 面体型; 只在一个方向有非晶体学对称轴的点群有很多: Nmm , N 取任意整数。

3. 简述液晶显示器的原理

答: 当通电时导通, 排列变的有秩序, 使光线容易通过; 不通电时排列混乱, 阻止光线通过。让液晶如闸门般地阻隔或让光线穿透。对于笔记本电脑或者桌面型的 LCD 显示器需要采用的更加复杂的彩色显示器而言, 还要具备专门处理彩色显示的彩色过滤层。在彩色 LCD 面板中, 每一个像素都是由三个液晶单元格构成, 其中每一个单元格前面都分别有红色, 绿色, 或蓝色的过滤器。这样, 通过不同单元格的光线就可以在屏幕上显示出不同的颜色。

4. 相变是如何分类的, 什么是 K-T 相变

相变的分类标志: 热力学势及其导数的连续性。热力学势和其第 $n-1$ 阶导数连续, 第 n 阶导数不连续就叫做 n 级相变。

二维体系尽管序参量总为零, 但在内部自由度为 2 时, 拓扑性质可随温度变化, 提出了拓扑序和拓扑性相变的新概念, 低温下正反拓扑缺陷两两配对, 温度升高到相变的临界温度时, 配对被热运动所拆散, 出现单个运动的拓扑缺陷。这种新的相变类型就叫 K-T 相变。

5. 写出金属中电子相互作用的几种表现方式

答: 屏蔽作用、集体振荡、电子-空穴对激发都与电子可以自由移动的特性或说电子气的密度涨落有关, 是电子相互作用的不同表现——一元化的研究途径

6. 描述激光打印机的工作原理

答: (1) 吸鼓带电: 在感光鼓 (也称吸鼓) 上用电极对感光体表面高压电晕放电, 使感光层表面带电荷。(2) 扫描曝光: 用受被打印内容调制的激光束对感光层扫描曝光, 受光照区域的电阻率下降, 表面电荷被中和而消失。在感光层上形成由静电荷分布构成的潜像 (电荷图案)。(3) 静电成像: 用含有炭精粉粒的显像剂与感光层接触。在静电场的作用下, 炭精粉粒附在感光层的曝光区域上, 形成可

见的炭精粉图象，这过程也称显像过程。(4) 着色转印：打印纸与已经显像的感光体接触，同时采用电晕带电体从纸的反面加电场，这时感光体表面的显像剂转移到打印纸上完成转印。(5) 热压定影：用热压器加热加压使着色剂牢固粘结在打印纸上，完成了静电打印。(6) 清洗吸鼓：将感光体用清洗器清除残留的色粉，准备下一张打印。(附注：静电复印机：同激光打印机相同，复印机也是利用光电技术和电子照相技术相结合的一种印字方式。复印机与激光打印机的主要区别是图象信息产生的方式不同。复印机是实物文件被反射照明后由成像镜头成像曝光在感光体上；而激光打印机则是由主计算机产生的图象数据经控制电路控制激光束的偏转和光强度扫描曝光完成打印的。)

7. 什么是介观体系？给出介观体系的普适电导涨落的物理解释

答：人们在对宏观，微观体系之间的过渡的新的认识中认识到存在一个新的和电子非弹性散射紧密关联的，电子保持相位记忆的特征尺度，或退相位长度 L_0 ，文献上把尺度相当于或小于 L_0 的小尺度体系称为介观体系，表示介于宏观体系与微观体系之间。

从样品一边到另一边的透射几率幅是许多通过样品的费曼路径相应的几率幅之和。在金属区电子通过样品时经历多次与杂质的散射，其费曼路径是无规行走式的准经典“轨道”，不同的费曼路径之间的相位差是不规则的，随机干涉效应 (Stochastic interference)，使电导呈现非周期的不规则涨落。

8. 定性评述一下纳米体系的磁学性质

答：(a) 超顺磁性 超顺磁性：矫顽力 $H_c \rightarrow 0$ ，对于 $\frac{\mu H}{k_B T} \ll 1$ 时：

$$\text{磁化强度: } M_s \approx \frac{\mu^2 H}{3k_B T}, \quad \mu \text{ 为粒子磁距}$$

起源：在小尺寸下，当各向异性能减少到与热运动能可相比拟时，磁化方向就不再固定在一个易磁化方向，易磁化方向作无规律的变化，结果导致超顺磁性的出现；(b) 矫顽力：纳米粒子尺寸高于超顺磁临界尺寸时通常呈现高的矫顽力每个粒子是一个单磁畴；(c) 居里温度：居里温度 T_c 与交换积分 J 成正比，并与原子构形和间距有关，纳米粒子的 T_c 比固体相应的低。纳米粒子中原子间距随着颗粒尺寸减少而减小。原子间距小将会导致 J 的减小，因而 T_c 下降。(d) 磁化率：纳米粒子的磁性与它所含的总电子数的奇偶性密切相关。电子数为奇数的磁化率服从：居里-外斯定律： $\chi = \frac{C}{T - T_c}$ 量子尺寸效应使磁化率遵从 d^{-3} 规律 (d 为平均颗粒直径)，电子数为偶数的磁化率服从： $\chi \propto k_B T$ ，磁化率遵从 d^2 规律。

9. 用双隧道结模型，说明什么是单电子库仑阻塞和库仑台阶效应

答：库仑阻塞效应是20世纪80年代所发现的极其重要的物理现象之一，当体系的尺度进入到纳米量级时，体系电荷是“量子化”的，即充电和放电过程是不连续的，充入一个电子所需能量为 $E_c = e^2/2C$ 。可见：体系越小， C 越小， E_c 就越大，我们称 E_c 为库仑阻塞能，库仑阻塞能是前一

一个电子对后一个电子的库仑排斥能，这就导致对一个小体系的充放电过程，电子不能集体传输，而是一个一个单电子的传输，通常把小体系的这种单电子输运行为称为库仑阻塞效应。

如果两个量子点用一个节连接起来，一个量子点上的单电子通过排垒到达另一个量子点，称为单电子隧穿。当温度足够低，即 $E_c > k_B T$ 时，这个势垒可以阻止电子隧穿，即库仑阻塞。两个量子点电压分别为 $\pm V/2$ ，在一个量子点上电量 $Q_s = 0$ 时，要使单电子隧穿过来，源量子点上所加电压 ($V/2$) 必须克服 E_c ，即 $V > e/C$ ，这样电子才可以成功隧穿。而当 $Q_s = e/2$ 时，量子点上的电势也随之改变，以至电子不受任何阻碍即可以隧穿，消除了库仑阻塞。由于库仑阻塞效应存在，电流和电压的上升不再是直线上升，而是在 $I-V$ 曲线上呈锯齿状台阶。

10. 简述 STM 的 Tersoff-Hamann 模型的假设和结论

答：假设：

结论：隧道电流正比于针尖曲率中心处 (r_0) 费米能级附近的样品的局域态密度 (LDOS)。在小偏压和低温实验条件下，对于晶格常数较大，离样品距离较远时，此模型有效。(无法解释低密勒指数金属表面的原子级分辨率的实验事实！)

11. 费米液体理论的适用条件是什么？为什么它对一维体系不适用？

答：适用条件：(1) 必须有可明确定义的费米面存在；(2) 准粒子有足够长的寿命。一维时体系的低能激发不是自旋 $1/2$ ，电荷为 $-e$ 的单粒子激发，而是具有电荷-自旋分离特征的电荷，自旋密度涨落，是一种集体激发。(一维时低能激发为自旋为 $1/2$ 的电中性自旋子和无自旋荷电为 $\pm e$ 的玻色子的激发。)

12. 写出整数霍尔效应的主要物理因素

13. 写出三种区分金属和绝缘体的方式

答：(1) 能带框架下的区分；(2) 无序引起的 Anderson 转变；(3) 电子间关联导致的 Mott 金属-绝缘体转变。

14. 写出玻色子和费米子的量子统计的分布函数，并简述什么是 BEC。

答： $\frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$ 玻色子系统的温度低于某特定温度 T_c 时，粒子向最低能态 (0) 聚集形成玻色凝聚态。 $T_c = \frac{h^2}{8mk_B} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$ 在 $T < T_c$ 范围内，所有粒子都聚集到最低能态。对于玻色子，当一定数量的粒子温度足够低，运动足够慢，而相互足够趋近，体系的所有粒子将一起转变到同一个最低能态，这就是玻色-爱因斯坦凝聚。(玻色-爱因斯坦凝聚是玻色子原子在冷却到绝对零度附近时所呈现出的一种气态的、超流性的物态。在这种状态下，几乎全部原子都聚集到能量最低的量子态，形成一个宏观的量子状态。玻色凝聚态有很多奇特的性质，请看以下几个方面：这些原子组成的集体步调非常一致，因此内部没有任何阻力。激光就是光子的玻色凝聚，在一束细小的激光里拥挤着非常多的颜色和方向一致的光子流。超导和超流也都是玻色凝聚的结果；玻色凝聚态的凝聚效应可以形成一束沿一定方向传播的宏观电子对波，这种波带电，传播中形成一束宏观电流而无需电压；原子凝聚体中的原子几乎不动，可以用来设计精确度更高的原子钟；应用于太空航行和精确定位等；玻色凝聚态的原子物质表现出了光子一样的特性正是利用这种特性。前年哈佛大学的两个研究小组用玻色-爱因斯坦凝聚体使光的速度降为零。

将光储存了起来。)

2002 年高固试题

1、固体物理、量子化学、凝聚态物理范式的核心内容。

答:

(1) 固体物理:

核心概念: 周期结构中波的传播、晶体的平移对称性(周期性)、波矢空间(倒空间)、强调共有化的价电子以及波矢空间的色散关系。

(2) 量子化学:

价键理论(电子配对理论)、分子轨道理论。核心思想: 实空间中的几何位形; 电子的局域化, 电子密度的集中和电荷的转移。

(3) 凝聚态物理:

对称性和对称破缺、有序相和基态、相变和临界现象、元激发(准粒子)、广义刚度与缺陷。

2、元激发定义、名称及类型。

答:

(1) 定义: 有相互作用的多粒子体系的低能激发态, 可以看成是一些独立的基本激发单元的集合, 它们具有确定的能量, 有时还有确定的动量。元激发使一个复杂的多体系统简化成接近于理想气体的准粒子系统。元激发不是简单的数学简化, 可以在实验上被观测, 理论上进行推导。

(2) 名称及类型:

集体激发 (多为 Bose 型):

[1] 离子-离子相互作用引起的晶格振动--声子(phonon);

[2] 磁性材料中的自旋-自旋相互作用引起的自旋波--磁振子(magnon);

[3] 金属中电子气相互作用引起的等离子体集体振荡--等离子激元(plasmaron);

[4] 光子和光学模声子耦合--极化激元(polariton)

个别激发 (多为 Fermi 型):

[1] 正常金属中相互作用的电子, 变换成屏蔽电子或准电子, 其有效质量增大(quasi-electron);

[2] 离子晶体中的电子或空穴在运动时带着周围极化场一起运动而形成的极化子(polaron);

[3] 半导体中的电子和空穴对(electron-hole pair) 激子

3、相变临界现象定义。其重整化群处理基本思想。

答:

(1) 定义: 临界现象: 物质处在或接近于临界点时所表现出来的独特行为。

系统的某些自由度表现出长波尺度上的反常大涨落, 与远离临界点的正常物质不同。这些大涨落使得凝聚态系统的正常宏观规律以某些剧烈和微妙的方式受到破坏。

(2) 思想: 临界点现象具有标度变换不变。这种对称性可用重整化群来表示。将关联长度发散的临界点与非线性变换的不动点联系起来, 建立一种与传统的统计方法不同的分析途径, 这种途径不直接配分函数, 而是研究保持配分函数形式不变的变换特性。

4、无序固体的重要特征[书 P152]。迁移率边的定义。

答: (1) 特征: 其一是电子经漫性散射, 相位有确定的改变, 当然改变量依不同的散射而异。此种意义下, 电子保持着相位记忆。其二, 如无序足够强时, 波函数可以是定域的, 波函数的包络随距离的增加指数衰减, 即 $|ψ(r)| ∝ exp(-|r - r_0|/ξ)$, 其中, $ξ$ 成为定域化长度(localization length)。

(2) 迁移率边: 在中等无序程度时, 无序系统既存在扩展态, 也有局域态, 扩展态在 TBA 能量中心, 局域态在带尾, 并有一个划分扩展态与局域态能量的分界 E_c 迁移率边。

5、无序体系直流电导变程跳跃和定程跳跃机制。

答:

无序体系直流电导变程跳跃和定程跳跃机制。无序体系直流电导变程跳跃和定程跳跃机制。

温度 $T \rightarrow 0$ 时, 体系的电导率 $\sigma = 0$, 绝缘体, $T \uparrow$, 电子可因热激活, 从一个定域位置跳到另一个, 产生跳跃电导 $\bar{R}_i, \epsilon_i \rightarrow \bar{R}_j, \epsilon_j$. 电子从隧穿到的两个决定因素:

(1) 两个态波函数的交叠. $\psi \propto \exp(-|r - \bar{R}|/\xi) \rightarrow P \propto \exp(-2R/\xi)$, $R = |\bar{R}_j - \bar{R}_i|$.

(2) 两个格点的能量差. $\Delta\epsilon = \epsilon_j - \epsilon_i > 0$, $P \propto \exp(-\Delta\epsilon/K_B T)$.

低温下(2)比(1)重要, 为变程跳跃. 此时 R 较大, $\Delta\epsilon$ 较小, 尽管波函数重叠因子 $\exp(-2R/\xi)$ 下降, 但从声子因子 $\exp(-\Delta\epsilon/K_B T)$ 处得到更多补偿, 即低温下电子在更大范围内选择能量相近的终态, 以使跳跃几率增加.

高温下(1)比(2)重要, 为定程跳跃. 此时 $\Delta\epsilon$ 较大, 初态在终态附近, 但因为温度高, 声子能够提供足够的能量.

6. 固体中电子弹性散射和非弹性散射如何区别. 如何通过它们定义介观体系.

答:

(1) 弹性散射是电子和杂质 (广义的是杂质原子和各种晶体缺陷) 的散射, 它不改变电子的能量, 只改变其晶体动量, 使电子从波矢 k 标记的布洛赫态散射到 k' 态, τ_e 是相应的弛豫时间. 弹性散射的入射波和出射波相位有确定的关系, 即“相位记忆”, 电子经弹性散射保持着相位的相干性. 电子非弹性散射, 如电子-声子之间的散射, 电子吸收或放出声子, 导致能量改变, τ_i 是相应的弛豫时间. 非弹性散射只能在统计意义上有所描述, 因而它破坏了电子的相位记忆, 或相位相干性.

(2) 尺度相当于或者小于 L_ϕ 的小尺度体系称为介观体系, 这里 L_ϕ 是一个和电子非弹性散射紧密关联的, 电子保持相位记忆的特征尺度, 或退相位长度. L_ϕ 与退相位时间 τ_ϕ 的关系由 $L_\phi = (D\tau_\phi)^{1/2}$ 给出, 对于 3 维体系, 扩散系数 $D = v_F l / 3$,

l 为弹性散射平均自由程.

7. 简述介观体系的 AB 效应、普适电导涨落.

答:

(1) AB 效应: [示意图在课本 P209] 从经典物理的观点, 电子束通路上没有磁场, 没有磁力作用在电子上, 螺线管中磁场不会产生任何影响. 然而按照量子力学, 电子将感受到与磁通量 Φ 相联系的矢势的存在, 波函数将附加一与矢势 A 有关、依赖于路径的相位. 屏上电子束的相位差 $\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2 = 2\pi\Phi/\Phi_0$, 其中 $\Phi_0 = h/e$ 是普通的磁通量子. 在屏上的干涉图像的强度为

$|\psi_1(\vec{r}_0) + \psi_2(\vec{r}_0)|^2 = 2|\psi_0(\vec{r}_0)|^2 [1 + \cos(2\pi\Phi/\Phi_0)]$, 其中 \vec{r}_0 为屏所在位置.

$\psi_j(\vec{r}_0) = \psi_0(\vec{r}_0) \exp(i\phi_j)$, $j = 1, 2$ 为两束电子在 \vec{r}_0 处的波函数. 干涉图像的强度随磁通量 Φ 周期性变化, 一周期中, 为超导体磁通量子 $\Phi_0 = h/2e$ 的两倍. 这一现象简称 AB 效应.

(2) 基本特征: a. 与时间无关的非周期涨落, 不是热噪声(和时间有关)。b. 这种涨落是样品特有的(sample-specific), 涨落花样可重复(pattern)。c. 涨落大小是 e^2/h 量级 ($\sim 4 \times 10^{-5} S$), 普适量。与样品的材料、尺寸、无序程度无关, 与样品的形状和空间维度只有微弱的关系, 只要求样品具有介观尺度, 并处于金属区: 即 $\lambda_F \ll l \ll L \leq L_c \ll \xi$ 。普适电导涨落的存在反映了介观体系和宏观体系本质上的差别。

和宏观体系本质上的差别。

8. 列出你所知道的纳米体系的基本物理效应。

答: (1) 小尺寸效应: 尺寸与光波波长、德布罗意波长以及相干长度等相当或更小时, 导致声、光、电磁、热力学等物性呈现新的小尺寸效应。

(2) 表面效应: 纳米体系由于微粒尺寸减小, 表面原子所占比例迅速增加, 具有大的比表面。和体内原子相比, 表面上的原子配位不足; 有大量的悬键或者不饱和键存在, 因而具有高的表面活性, 易于和其它原子结合, 使表面得到稳定。这使得纳米微粒对环境, 如温度、气氛、湿度、光照等十分敏感。

(3) 量子尺寸效应:

$$n = \frac{N}{V} \text{ 不变; } \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad g(\epsilon_F) = \frac{3n}{2\epsilon_F}, \quad \delta = \frac{2}{g(\epsilon_F)V} = \frac{4\epsilon_F}{3N} \rightarrow \delta \sim \frac{1}{d^3}$$

$\delta > k_B T$: 出现量子尺寸效应。

如果对单个金属微粒做测量, 在足够低的温度下会发现它处于非金属态。

(4) 宏观量子隧道效应: 微观粒子具有贯穿势垒的能力。一些宏观量, 例如微颗粒的磁化强度, 量子相干器件中的磁通量等亦有隧道效应, 称为宏观的量子隧道效应。

(5) 库仑阻塞与库仑台阶效应: 当微粒尺寸很小时, 由于静电能的变化远超过 $k_B T$, 电荷的改变十分困难, 单电子从一个微粒通过绝缘层隧穿到另一个微粒, 由于使体系能量改变过大而在一定范围内被禁止, 这种现行成为隧穿过程的库仑阻塞。

(6) 介电限域效应:

纳米微粒分散在异质介质中由于界面引起的体系介电增强现象。

9. 简述量子霍尔效应

答: 1. 霍尔电阻有台阶; 2. 台阶高度为 h/ie^2 , i 为整数, 对应于占满第 i 个 Landau 能级, 精度大约为 5 ppm ; 3. 台阶处纵向电阻为零。

10. 密度泛函理论的理论基础。

答: N 个电子体系的基态电子密度 $n(\mathbf{r})$ 和作用在体系上的外加电场 $v(\mathbf{r})$ 有一一对应关系。这里, 是相差一无实质意义常数的势场为同一势场。

11. 什么是费米液体, 成为费米液体的条件是什么。

答: 可以用准粒子图像来描述的遵从费米统计的相互作用的多粒子体系:

条件: (1) 必须有可明确定义的费米面存在。

在平衡态下, n_s 服从费米分布 $n_s = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(p) - \mu)/k_B T} + 1}$, $\epsilon(p)$ 与温度有关。

$n(k) = Z(k)\epsilon[\mu - \epsilon(k)] + \Phi(k)$, $\Phi(k)$ 是一个连续变化函数。

物理图像: 一个准粒子可以看作由一个裸粒子(比例为 $Z(k_s)$)加上周围

其他元激发的贡献(比例 $(1 - Z(k_s))$, 对应的占据率为 $\Phi(k)$),

$m^* = m \frac{1}{Z} = \frac{1}{Z} \Rightarrow$ 正常费米液体要求 $0 < Z(k_s) \leq 1$, $Z(k_s) = 0$ 准粒子图像失效。

(2) 准粒子有足够长的寿命。

一、简答

1、什么是极化子？给出极化子空间大小的估算。

Semi-metal
half-metal

离子晶体中电子或者空穴运动时，受到离子晶体中离子的库仑作用，使得周围晶格极化，形成围绕电子的极化场，反过来影响电子的运动。我们把电子以及由于电子引起的极化场构成的整体叫做极化子，它是慢电子与光学模纵声子相互作用系统的准离子。

极化子的大小可由电子（或空穴）周围晶格畸变区域的大小决定。这个区域比晶格常数大得多时称为大极化子，这时离子晶体可以当作连续介质处理；当电子（或空穴）周围晶格畸变区小于或等于晶格常数量级时，必须考虑晶格结构的原子性，并用晶格模型处理极化子问题，这就是小极化子。

2、描述 Graphene 体系电子结构的特点

每个 C 原子包含 4 个价电子，在 graphene 中，其中 3 个参与最近邻碳原子的 SP2 杂化，形成 sigma 键，最终扩展成满占据的 sigma 带；第四个电子处于 2Pz 态，相邻碳原子 2Pz 轨道态的交叠形成 pi 键，在二维 graphene 体系中扩展成 pi 能带，pi 带半满，决定整个体系的电性。

3、列举数各自高温超导体发现后新的有影响的超导体系

- 铜氧化物超导体，如 YBa₂Cu₃O₇, Bi₂Sr₂Ca₂Cu₃O₁₀, Tl₂Ba₂Ca₂Cu₃O₁₀,
- | | |
|---|-----|
| 1990s: 掺杂 C60 超导 | 30K |
| 2001: 常规超导合金(MgB ₂) | 39K |
| 2003: Na _{0.3} CoO ₂ 超导 | 5K |
| 2004: B doped Diamond 超导 | ~4K |
| 2008: LaO(1-x)FxFeAs(x=0.05-0.12) | 26K |

4、什么是渗流相变？分维是怎么定义的？

渗流：流体在随机介质中的运动

每格点被占据的几率为 P，不占据的几率为 1-P。相邻格点都被占据，这些格点形成一个集团。当 P 增大，集团的大小增大，P 达到一个临界点 P_c，点阵上就出现一个无限大集团，这就是渗流相变。其中 P_c 是渗流阈值或渗流临界值，k 为标度因子，N 为最小原始单元的数目，log_kN 为分数维度。

标度因子，最小原始单元数目 log_kN 为分数维度

5、什么是 Anderson-局域化？迁移率边是如何定义的？

局域化的严格定义：热力学极限下的体系 (N、V 无限大，N/V 有限)，设 t=0 时 1 格点(或附近)有一个电子，经过较长时间后在该格点找到电子的几率振幅为 A(t)，A(t)=0 为扩展态，否则为局域态。

$$\text{Anderson 模型的哈密顿量: } H = \sum_i \epsilon_i C_i^\dagger C_i + \sum_{i,j} T_{ij} C_i^\dagger C_j$$

在 Anderson 模型中，格点的在位能在某一能量间隔内均匀分布，并且无规律变化，分布函数写为：

$$|\epsilon| < W/2 \text{ 时, } P(\epsilon) = \frac{1}{W}$$

程台阶状的现象，这就是量子 Hall 效应。台阶的高度为 $\frac{h}{ie^2}$ ，台阶处纵向电阻为

0. 整数量子 Hall 效应可以用单电子图像来描述，而分数量子 Hall 效应是 2DEG 中多电子强关联运动的结果，其部分占据态和最低激发态间能隙的出现都是缘于多体效应。

应用：(1) h/e^2 可以作为新的电阻标准 (2) 可以用来测量精细结构常数

$$\alpha = \frac{e^2}{2hc\epsilon_0}$$

10、简述费米空穴和库仑空穴的物理含义

费米空穴：由于 Pauli 不相容原理，自旋相同的两个电子不能无限靠近。这样使得与基电子自旋相同的其余邻近电子在围绕该电子形成总量为 1 的密度亏欠域。

库仑空穴：由于电子之间存在 Coulomb 相互作用，使得不同自旋的两个电子也不能无限靠近，在某电子离开其平衡位置形成的电荷为 +e 的电荷补偿，这种准粒子称为库仑空穴。

11、写出玻色-爱因斯坦以及费米-狄拉克量子统计的分布函数

$$\text{Bose 分布: } n(E) = \left(e^{(E-\mu)/kT} - 1 \right)^{-1}$$

$$\text{Fermi 分布: } n(E) = \left(e^{(E-\mu)/kT} + 1 \right)^{-1}$$

12、写出 Ising 模型表达式，简要说明其对统计物理的贡献。

$$H = -J \sum_{i,j} \overline{s_i} \cdot \overline{s_j}$$

1D 情况下，Ising 模型的严格解和 Landau 二级相变理论相符合，2D Ising 模型的严格解 Landau 二级相变理论相差很远，引发了统计物理临界现象领域的革命。

13、简述燃料电池的工作原理

燃料电池是将燃料的化学能直接转化为电能的装置。首先使燃料离子化，然后在阳极发生氧化反应，阴极发生还原反应，体系中形成电流。

14、什么叫电荷密度波？它的波长由什么决定？

电荷密度波：一维体系发生 Peierls 相变后，晶格周期由 a 变为 a' ，形变后周期为 a' 的晶格称之为超晶格。晶格的畸变，导致离子实的正电荷按照波长 $\lambda = a' = \pi / k_F$ 在空间周期变化，由于体系要保持电中性，致使导电电子的密度在这一新的周期场中重新分布，称为 CDW，波长由 Fermi 波矢 k_F 决定，与原来的晶格常数无关。

假设从左边 j 通道经第 α 条 Feynman 路径反射到 i 通道的概率幅为 $(b_\alpha)^{1/2} e^{i\varphi_\alpha}$, 则有:

$$R_{ij} = \left| \sum_{\alpha} (b_\alpha)^{1/2} e^{i\varphi_\alpha} \right|^2 = \sum_{\alpha, \beta} (b_\alpha b_\beta)^{1/2} \cos(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \quad \text{----- (5)}$$

$$= \sum_{\alpha} b_\alpha + \sum_{\alpha \neq \beta} (b_\alpha b_\beta)^{1/2} \cos(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \quad \text{----- (6)}$$

对 (5) 式做系综平均, 忽略弱局域化效应, 右边第二项平均值为 0。则 (5) 式化为:

$$\langle R_{ij} \rangle^2 = \left\langle \sum_{\alpha} b_\alpha \right\rangle^2 = \sum_{\alpha, \beta} \langle b_\alpha \rangle \langle b_\beta \rangle \quad \text{----- (7)}$$

由 (5) 式,

$$\begin{aligned} R_{ij}^2 &= \left[\sum_{\alpha, \beta} (b_\alpha b_\beta)^{1/2} \cos(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \right]^2 \\ &= \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} (b_\alpha b_\beta b_\gamma b_\delta)^{1/2} \cos(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \cos(\varphi_\gamma - \varphi_\delta) \\ &= \sum_{\alpha, \beta} b_\alpha b_\beta + 2 \sum_{\alpha \neq \beta} b_\alpha b_\beta \cos^2(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) + 2 \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} (b_\alpha b_\beta)^{1/2} b_\gamma \cos^2(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \\ &\quad + 2 \sum_{\substack{(\alpha, \beta) \neq (\gamma, \delta), \\ \alpha \neq \beta, \gamma \neq \delta}} (b_\alpha b_\beta b_\gamma b_\delta)^{1/2} \cos(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \cos(\varphi_\gamma - \varphi_\delta) \end{aligned} \quad \text{----- (8)}$$

取系综平均, 等式右边第三、四项为零, 第二项 $\langle \cos^2(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \rangle = 1/2$, 同时有

$$\sum_{\alpha \neq \beta} b_\alpha b_\beta = \sum_{\alpha, \beta} b_\alpha b_\beta - \sum_{\alpha} b_\alpha^2 \approx \sum_{\alpha, \beta} b_\alpha b_\beta \quad \text{----- (9)}$$

因为 Feynman 路径的 b_α 大致相等, 故 $\sum_{\alpha} b_\alpha^2$ 与 $\sum_{\alpha, \beta} b_\alpha b_\beta$ 相比, 数量级为 $1/N_j$,

其中 N_j 为 Feynman 路径的总数。

带入 (7) 式, 得

$$\langle R_{ij}^2 \rangle \approx \left\langle 2 \sum_{\alpha, \beta} b_\alpha b_\beta \right\rangle = 2 \sum_{\alpha, \beta} \langle b_\alpha \rangle \langle b_\beta \rangle \quad \text{----- (10)}$$

$$\text{故 } \langle R_{ij}^2 \rangle = 2 \langle R_{ij} \rangle^2 \quad \text{----- (11)}$$

(7) 代入 (6), 得临界温度:

$$T_c = \frac{2\pi}{(2.612)^{2/3}} \frac{\hbar^2}{mk} n^{2/3} \quad (8)$$

若考虑自旋, g 为自旋因子, 粒子数表达式上加上自旋因子即可。