

国家出版基金资助项目

中外物理学精品书系·前沿系列

凝聚态量子理论

尹道乐 尹 澜 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

国家出版基金资助项目

图书在版编目(CIP)数据

凝聚态量子理论/尹道乐,尹澜编著. —北京:北京大学出版社,2010.5

(中外物理学精品书系)

ISBN 978-7-301-16160-9

I. 凝… II. ①尹…②尹… III. 凝聚态-物理学 IV. O469

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 222819 号

书 名: 凝聚态量子理论

著作责任者: 尹道乐 尹 澜 编著

责任编辑: 顾卫宇

标准书号: ISBN 978-7-301-16160-9/O · 0809

出版发行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://www.pup.cn>

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62752021

出版部 62754962

电子邮箱: zpup@pup.pku.edu.cn

印刷者: 北京中科印刷有限公司

经 销 者: 新华书店

730 毫米×980 毫米 16 开本 13.25 印张 248 千字

2010 年 5 月第 1 版 2010 年 5 月第 1 次印刷

定 价: 35.00 元

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究

举报电话:010-62752024 电子邮箱:fd@pup.pku.edu.cn

《中外物理学精品书系》 编委会

主任：王恩哥

副主任：夏建白

编委：（按姓氏笔画排序，标*号者为执行编委）

王力军	王孝群	王 牧	王鼎盛	石 兢
田光善	冯世平	邢定钰	朱邦芬	朱 星
向 涛	刘 川*	许宁生	许京军	张 酣*
张富春	陈志坚*	林海清	欧阳钟灿	周月梅*
郑春开*	赵光达	聂玉昕	徐仁新*	郭 卫*
资 剑	龚旗煌	崔 田	阎守胜	谢心澄
解士杰	解思深	潘建伟		

秘 书：陈小红

内 容 简 介

本书是根据作者多年来在北京大学物理系和物理学院开设固体理论课程的讲义基础上修改补充而成。共七章,分为三个部分,由简入繁分步骤地介绍用多体量子力学分析实际凝聚态物质的理论方法。在第一部分“多电子系统的表述”中系统地讲述如何用多体量子理论来分析凝胶模型这个描述金属中巡游电子的最常用模型。在第二部分“固体电子论”中突破了“凝胶模型”的限制,讲述如何分析和计算在实际正离子场中的电子系统的方法。在第三部分“集体现象理论”中进一步把可能的正离子运动也包含进来,全面分析实际凝聚态物质中各种复杂多样的多粒子体系,并介绍了一些近年来相关研究的进展。

序 言

物理学是研究物质、能量以及它们之间相互作用的科学。她不仅是化学、生命、材料、信息、能源和环境等相关学科的基础,同时还是许多新兴学科和交叉学科的前沿。在科技发展日新月异和国际竞争日趋激烈的今天,物理学不仅囿于基础科学和技术应用研究的范畴,而且在社会发展与人类进步的历史进程中发挥着越来越关键的作用。

我们欣喜地看到,改革开放三十多年来,随着中国政治、经济、教育、文化等领域各项事业的持续稳定发展,我国物理学取得了跨越式的进步,做出了很多为世界瞩目的研究成果。今日的中国物理正在经历一个历史上少有的黄金时代。

在我国物理学科快速发展的背景下,近年来物理学相关书籍也呈现百花齐放的良好态势,在知识传承、学术交流、人才培养等方面发挥着无可替代的作用。从另一方面看,尽管国内各出版社相继推出了一些质量很高的物理教材和图书,但系统总结物理学各门类知识和发展,深入浅出地介绍其与现代科学技术之间的渊源,并针对不同层次的读者提供有价值的教材和研究参考,仍是我国科学传播与出版界面临的一个极富挑战性的课题。

为有力推动我国物理学研究、加快相关学科的建设与发展,特别是展现近年来中国物理学家的研究水平和成果,北京大学出版社在国家出版基金的支持下推出了《中外物理学精品书系》,试图对以上难题进行大胆的尝试和探索。该书系编委会集结了数十位来自内地和香港顶尖高校及科研院所的知名专家学者。他们都是目前该领域十分活跃的专家,确保了整套丛书的权威性和前瞻性。

这套书系内容丰富,涵盖面广,可读性强,其中既有对我国传统物理学发展的梳理和总结,也有对正在蓬勃发展的物理学前沿的全面展示;既引进和介绍了世界物理学研究的发展动态,也面向国际主流领域传播中国物理的优秀专著。可以说,《中外物理学精品书系》力图完整呈现近现代世界和中国物理

科学发展的全貌,是一部目前国内为数不多的兼具学术价值和阅读乐趣的经典物理丛书。

《中外物理学精品书系》另一个突出特点是,在把西方物理的精华要义“请进来”的同时,也将我国近现代物理的优秀成果“送出去”。物理学科在世界范围内的重要性不言而喻,引进和翻译世界物理的经典著作和前沿动态,可以满足当前国内物理教学和科研工作的迫切需求。另一方面,改革开放几十年来,我国的物理学研究取得了长足发展,一大批具有较高学术价值的著作相继问世。这套丛书首次将一些中国物理学者的优秀论著以英文版的形式直接推向国际相关研究的主流领域,使世界对中国物理学的过去和现状有更多的深入了解,不仅充分展示出中国物理学研究和积累的“硬实力”,也向世界主动传播我国科技文化领域不断创新的“软实力”,对全面提升中国科学、教育和文化领域的国际形象起到重要的促进作用。

值得一提的是,《中外物理学精品书系》还对中国近现代物理学科的经典著作进行了全面收录。20世纪以来,中国物理界诞生了很多经典作品,但当时大都分散出版,如今很多代表性的作品已经淹没在浩瀚的图书海洋中,读者们对这些论著也都是“只闻其声,未见其真”。该书系的编者们在这方面下了很大工夫,对中国物理学科不同时期、不同分支的经典著作进行了系统地整理和收录。这项工作具有非常重要的学术意义和社会价值,不仅可以很好地保护和传承我国物理学的经典文献,充分发挥其应有的传世育人的作用,更能使广大物理学人和青年学子切身体会我国物理学研究的发展脉络和优良传统,真正领悟到老一辈科学家严谨求实、追求卓越、博大精深的治学之美。

温家宝总理在2006年中国科学技术大会上指出,“加强基础研究是提升国家创新能力、积累智力资本的重要途径,是我国跻身世界科技强国的必要条件”。中国的发展在于创新,而基础研究正是一切创新的根本和源泉。我相信,这套《中外物理学精品书系》的出版,不仅可以使所有热爱和研究物理学的人们从中获取思维的启迪、智力的挑战和阅读的乐趣,也将进一步推动其它相关基础科学更好更快地发展,为我国今后的科技创新和社会进步做出应有的贡献。

《中外物理学精品书系》编委会 主任

中国科学院院士,北京大学教授

王恩哥

2010年5月于燕园

作者前言

现代凝聚态物理是随着量子力学的建立而发展起来的一个重要的研究领域. 它的研究对象固体和液体是原子密度数量级约为 10^{23} cm^{-3} 的凝聚态物质. 在大多数情况下, 每个原子还可以进一步分成离子实和外层电子两大类粒子, 其中离子实由原子核以及与其紧密相连的内层电子所组成, 带有正电荷; 而外层电子则带有负电荷, 并可能在局域态和巡游态之间转化. 每个离子实和外层电子之间有很强的电磁相互作用, 而同类粒子之间也有着不可忽略的长程电磁相互作用. 不难想象, 实际的固体和液体是一个十分复杂的多粒子体系. 要深入了解和描述这个体系的运动规律显然离不开多体量子力学的知识.

1947 年晶体管的发明开创了固体电子学的新时代. 实验和理论之间的相互促进有力地推动了第二次世界大战以后科学技术的飞速发展. 这个时期的诺贝尔物理学奖约有三分之一授予了与凝聚态物理有关的项目, 生动地反映了这个学科的发展情况.

为了适应学科发展的需要, 在 20 世纪 50 年代, 与世界各国相似, 我国大学普遍为物理本科生开设了固体物理的课程, 讲授有关固体的基本知识. 比较知名的典型教材有 C. Kittel 所著 *Introduction to Solid State Physics* 和我国著名学者程开甲、黄昆、谢希德和方俊鑫先后著作的《固体物理学》等.

然而, 修本科固体物理课程的学生大多数只学过单体的量子力学, 不可避免受到一定的局限. 因此从 20 世纪 60 年代开始, 在开设固体物理课的基础上又出现了为已经学过量子力学和固体物理课程的一年级研究生和高年级本科生开设的固体理论课程. 它与本科的固体物理课程之间的关系有些像电动力学与基础物理的电磁学之间的关系. 国际上已出版的这方面的教学参考书中比较知名的有 C. Kittel 的 *Quantum Theory of Solids*, A. L. Fetter, J. D. Walecks 的 *Quantum Theory of Many-Particle System*, D. Pines 的 *Elementary Excitations in Solids*, H. Haken 的 *Quantum Field Theory of Solids*, J. Callaway 的 *Quantum Theory of the Solid State*, G. D. Mahan 的 *Many-Particle Physics* 和 P. W. Anderson 的 *Basic Notions of Condensed Matter Physics* 等. 国内已出版的有李正中所著的《固

体理论》等。

在北京大学, 固体理论课是物理学院凝聚态专业研究生的必修课, 本专业选课的学生既有理论方向也有实验方向, 还有一些高年级的本科生和其他物理专业以及其他学院的研究生。由于学生的基础不同, 并且课时有限, 首先需要讲授基础知识和基本方法, 在此基础上对近年来一些重要的研究进展作适当的介绍, 其中一些是与诺贝尔物理学奖有关的研究成果。

本书是根据作者多年来在北京大学物理系和物理学院开设固体理论课程的讲义基础上修改补充而成。共七章, 分为三个部分, 由简入繁分步骤地系统地介绍用多体量子力学分析实际凝聚态物质的理论方法。第一部分包含一、二两章, 采用简化了的“凝胶模型”来描绘大量的正离子实, 在此基础上系统地讲述如何用多体量子理论来分析金属中的巡游电子这个典型的多费米子系统。在介绍了多体量子理论的分析方法以后, 在第二部分“固体电子论”中突破了过于简化的“凝胶模型”的限制, 讲述如何分析和计算实际正离子场中的多电子系统的方法。第三部分“集体现象理论”包含五、六、七三章, 进一步把可能的正离子运动也考虑进来, 全面分析实际凝聚态物质中各种复杂多样的多粒子体系。第五章以声子理论作为典型, 系统地讲述正离子系统在平衡位置附近的振动规律。第六章进一步介绍类声子玻色子元激发与相互作用。第七章着重讨论处于物理学研究前沿的宏观量子现象和强关联问题。

在本书成稿过程中, 陆果、陈凯旋和薛立新等老师给予了宝贵的帮助, 胡翔和贺丽等研究生也参加了书稿的修正工作, 本书责任编辑作了精心校对, 作者在此谨表谢忱。

中 外 物 理 学 精 品 书 系

本书出版得到“国家出版基金”资助

目 录

第一部分 多电子理论

第一章 多电子系统的表述	3
§ 1.1 朗道的费米液体理论简介	3
§ 1.2 托马斯-费米近似与密度泛函方法	7
§ 1.3 全同粒子波函数表示与哈特里-福克近似	9
§ 1.4 电子气的微扰论处理	13
第二章 格林函数方法	19
§ 2.1 单体问题中的格林函数	19
§ 2.2 单体格林函数的微扰论	23
§ 2.3 多体系统的单粒子格林函数($T=0$)	25
§ 2.4 多粒子格林函数与线性响应理论	30
§ 2.5 $T=0$ 的多体微扰论	35
§ 2.6 $T\neq 0$ 时的多体系统的格林函数	43
§ 2.7 松原温度格林函数	45
§ 2.8 无规相位近似(RPA)描述的电子气	50

第二部分 固体电子论

第三章 周期场中的电子系统	57
§ 3.1 周期平移对称性与布洛赫定理	57
§ 3.2 布洛赫函数的正交性与完备性	59
§ 3.3 布洛赫函数与空间群	61
§ 3.4 相对论效应	68
§ 3.5 费米面与状态密度	72
§ 3.6 表象理论	75

第四章 固体电子结构计算方法与模型	82
§ 4.1 平面波与正交化平面波(OPW)方法	82
§ 4.2 赝势方法	85
§ 4.3 Wigner-Seitz 元胞与糕模势方法	87
§ 4.4 紧束缚近似(TBA)方法	95
§ 4.5 自洽势场	100
§ 4.6 关联效应及 Hubbard 模型	102

第三部分 集体现象理论

第五章 声子理论	113
§ 5.1 绝热近似	113
§ 5.2 格波	114
§ 5.3 声子	118
§ 5.4 频谱	121
§ 5.5 非简谐相互作用	123
§ 5.6 声子格林函数	125
§ 5.7 原子间力模型	127
第六章 类声子元激发与相互作用	133
§ 6.1 离子晶体中的极化激元	133
§ 6.2 极化子	140
§ 6.3 激子和等离子体子	143
§ 6.4 自旋波	145
§ 6.5 金属中的电子-声子相互作用	152
§ 6.6 声子对射束的散射	161
第七章 宏观量子现象和强关联现象	166
§ 7.1 超导电性	166
§ 7.2 玻色-爱因斯坦凝聚与超流	172
§ 7.3 电子局域化	179
§ 7.4 磁掺杂和近藤效应	183
§ 7.5 量子霍尔效应	190
索引	198

第一部分 多电子理论

第一章 多电子系统的表述

电子是凝聚态物质中最活跃的一类粒子,是影响凝聚态物质结构和性质的一个主要因素.量子力学是在考虑单电子运动规律的基础上建立起来的,然而实际固体都是含有许多电子的体系,如何表述并处理多电子系统是凝聚态理论首先碰到的一个问题.

§ 1.1 朗道的费米液体理论简介

电子的自旋是 $1/2$,属于费米子,并带有量子化的负电荷 $-e$,其波函数具有反对称性.凝聚态物质中的电子系统是有库仑相互作用的多费米子系统.对比电子系统, ^3He 液体是另一类典型的多费米子系统.每个 ^3He 原子的电荷为零,原子之间的相互作用是范德瓦耳斯势,属于短程势,在远距离是弱的吸引势,在近距离是很强的排斥势,与电子之间长程的库仑相互作用差别较大.朗道从分析 ^3He 液体的低温性质出发,提出了一个唯象的用来描述多费米子系统的“费米液体理论”^[1],它的出发点是几个基本假设.

费米液体理论的第一个基本假设是:在低温下有相互作用的费米子系统(费米液体)和无相互作用的费米子系统(理想费米气体)具有相同的激发态结构.换句话说,可以想象由无相互作用费米子系统的某个本征态出发,绝热缓慢地引入相互作用,从而得到有相互作用时费米子系统的本征态.因此我们可以用相同的量子数来标记这两个相对应的态.

在零温度时理想费米气体处于基态,在波矢空间填满了半径为费米波矢 k_F 的球.理想费米气体的基态和激发态可以用粒子在波矢及自旋空间的占据情况来标记.对于波矢小于 k_F 的单粒子态,如果它没有被占据,则系统中出现了一个空穴型的单粒子激发;而对于波矢大于 k_F 的单粒子态,如果它被占据,则系统中出现了一个粒子型的单粒子激发.所以理想费米气体的激发态是由多个单粒子激发构成的.

对于有相互作用的费米子系统,由单粒子态的占据情况出发并不能直接构成系统的本征态.因此费米液体理论引入了准粒子的概念,每个准粒子都对应着无相互作用时的一个粒子,它们具有相同的波矢和自旋,准粒子的总数也和真实粒子的数目相同,

$$\sum_{\sigma} \int n_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{N}{V}, \quad (1.1.1)$$

其中 $n_\sigma(\mathbf{k})$ 是波矢为 \mathbf{k} 、自旋为 σ 的准粒子的数目, N 为总粒子数, V 为体积. 系统所处的状态可以由准粒子的占据情况来描述. 在费米液体的基态, 准粒子在波矢空间填满了半径为 k_F 的球. 当某个准粒子的数目变化时, 费米液体就出现了单粒子的激发.

但是准粒子毕竟与无相互作用时的粒子不同, 费米液体理论的另一个基本假设就是: 准粒子之间存在相互作用, 并且这种相互作用可以用自洽的平均场来描述, 即每个准粒子都受到周围其他准粒子所产生的自洽场的作用. 换句话说, 每个准粒子的能量与周围其他准粒子的分布状态有关, 整个体系的能量 E 不再是所有准粒子能量的总和, 而是准粒子分布函数 $n_\sigma(\mathbf{k})$ 的泛函, 体系的能量变化 δE 等于由所有准粒子分布变化而引起的能量变化之和,

$$E = E[n_\sigma(\mathbf{k})],$$

$$\delta E = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_\sigma \int \epsilon_\sigma(\mathbf{k}) \delta n_\sigma(\mathbf{k}) d^3 k, \quad (1.1.2)$$

其中的准粒子能量 $\epsilon_\sigma(\mathbf{k})$ 也可以写成泛函微商的形式

$$\epsilon_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{\delta(E/V)}{\delta n_\sigma(\mathbf{k})}. \quad (1.1.3)$$

根据费米液体理论的第一个基本假设, 费米液体和理想费米气体的激发态是按同样原则构成的. 因此费米液体的熵可以由理想费米气体熵的公式来描述, 只是现在相关的变量是准粒子的分布函数 $n_\sigma(\mathbf{k})$,

$$S = -\frac{k_B}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \{n_\sigma(\mathbf{k}) \ln[n_\sigma(\mathbf{k})] + [1 - n_\sigma(\mathbf{k})] \ln[1 - n_\sigma(\mathbf{k})]\}, \quad (1.1.4)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数. 在平衡态, 费米液体的自由能 $F = E - TS$ 是准粒子分布函数 $n_\sigma(\mathbf{k})$ 的极小值. 在保持准粒子总数 N 不变的条件下,

$$\delta N = 0, \quad (1.1.5)$$

如果对自由能 F 求变分并令其为零, 便可以得到在平衡态准粒子的分布函数为费米分布函数

$$n_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{e^{[\epsilon_\sigma(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T} + 1}, \quad (1.1.6)$$

其中 μ 是化学势, 即增加一个粒子所引起的自由能的改变,

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}. \quad (1.1.7)$$

然而应该注意的是根据(1.1.2)和(1.1.3)所体现的泛函关系, 准粒子能量 $\epsilon_\sigma(\mathbf{k})$ 也应是准粒子分布 $n_\sigma(\mathbf{k})$ 的泛函. 所以, 实际上(1.1.6)式隐含着一个复杂的泛函关系.

为了较好地分析费米液体低能激发态的物理性质, 朗道对能量的变化 δE 的描述精确到了 δn 的二级项, 即

$$\begin{aligned} \frac{\delta E}{V} = & \sum_{\sigma} \int \epsilon_{\sigma}^0(\mathbf{k}) \delta n_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n_{\sigma}(\mathbf{k}) \delta n_{\sigma'}(\mathbf{k}') \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3}, \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

其中 $\epsilon_{\sigma}^0(\mathbf{k})$ 是处在平衡态时准粒子的能量, 函数 $f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 是能量的二次泛函微商

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv \frac{\delta^2(E/V)}{\delta n_{\sigma}(\mathbf{k}) \delta n_{\sigma'}(\mathbf{k}')} = f'_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (1.1.9)$$

在相互作用趋于零时, f 函数也趋于零, 所以它又被称为“相互作用函数”. (1.1.3) 式中的准粒子能量 $\epsilon_{\sigma}(\mathbf{k})$ 也可用它表示,

$$\epsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\sigma}^0(\mathbf{k}) + \sum_{\sigma'} \int f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n_{\sigma'}(\mathbf{k}') \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3}. \quad (1.1.10)$$

在费米能级附近, 准粒子的能量遵守近似式

$$\epsilon_{\sigma}^0(\mathbf{k}) = \mu_0 + \hbar^2(k^2 - k_F^2)/2m^* \approx \mu_0 + \hbar v_F(k - k_F), \quad (1.1.11)$$

其中 v_F 是在费米面上的准粒子速率, m^* 是准粒子的有效质量. 由于相互作用, m^* 和粒子的质量 m 存在着差别, 这可以通过相互作用函数 f 来表示. 朗道认为, 在低温下如果费米液体流动, 则准粒子和真实粒子具有相同的动量密度和粒子数目通量, 从而可以得到关系式

$$\sum_{\sigma} \int n_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \sum_{\sigma} \int n_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}, \quad (1.1.12)$$

利用变分后可得

$$\sum_{\sigma} \int \delta n_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \sum_{\sigma} \int \frac{1}{\hbar} [\delta n_{\sigma}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \delta \epsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} n_{\sigma}(\mathbf{k})] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3},$$

考虑对费米面附近的波矢有 $\nabla_{\mathbf{k}} n_{\sigma}(\mathbf{k}) \approx -\delta[\epsilon_{\sigma}(\mathbf{k}) - \epsilon_F] \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_{\sigma}(\mathbf{k})$, 最后可以得到准粒子和真实粒子质量之间的关系式,

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} - \frac{2k_F}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int_{\text{F.S.}} d\Omega_{\mathbf{k}} \cos\theta f(\cos\theta), \quad (1.1.13)$$

上式中“F. S.”表示在费米面上对立体角的积分, $f(\cos\theta)$ 表示对 $f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 的自旋角标分别求和, \mathbf{k} 和 \mathbf{k}' 都被限制在费米面上, \mathbf{k} 和 \mathbf{k}' 之间的夹角为 θ .

相互作用函数 $f_{\sigma\sigma'}$ 与自旋变量的关系可一般表示为直接部分 f_d 和交换部分 f_x , 即

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f_d(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + f_x(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (1.1.14)$$

费米液体的许多物性都是通过准粒子的分布函数来表现, 可以用相互作用函数来表示:

(i) 比热

$$c_V = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 N(\mu) T, \quad (1.1.15)$$