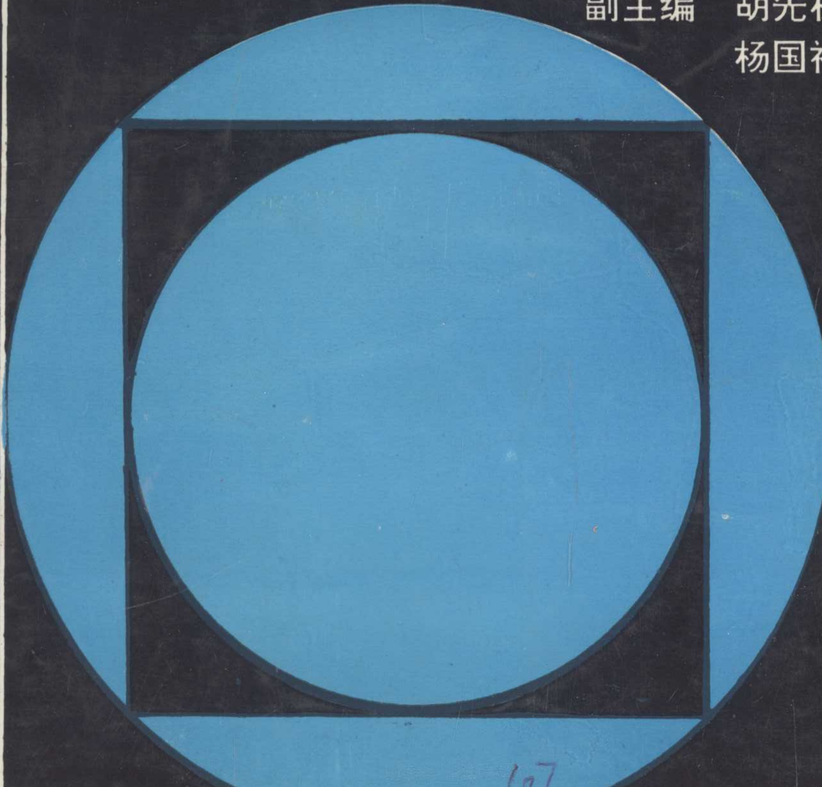
GUTI LILUN JIQI YINGYONG

固体理论及其应用

主　编　郑瑞伦
副主编　胡先权
　　　　杨国祥



西南师范大学出版社

固体理论及其应用

主　编:郑瑞伦
副主编:胡先权　杨国祥
参　编:方　可　张文彬

西南师范大学出版社

责任编辑：谢慈仪
封面设计：王　煤

固体理论及其应用

郑瑞伦　　主编

西南师范大学出版社出版、发行
（重庆　北碚）
新华书店经销
重庆北碚培萃印刷厂印刷
开本：850×1168 1/32 印张：12.375　字数：300千
1996年7月　第一版　1996年7月　第1次印刷
印数：1—1000
ISBN 7—5621—1540—0/O·54
定价：14.00元

内容简介

本书系统地介绍了固体理论的基本概念、模型和方法，反映了国内外的新成果。全书共分八章：第一章介绍了场的量子化的有关基础知识。从第二章起，依次介绍了晶体电子能带理论、电子—电子相互作用、固体磁性理论、晶格振动、电子与声子相互作用等固体理论中的基本内容。第七章介绍了格林函数理论。第八章介绍了纳米微粒与分形理论的有关知识。

本书可作为综合性大学物理系的研究生和高年级学生学习固体理论课的教材，更适合于师范院校和理工科院校有关凝聚态物理和材料科学等专业的研究生使用，也可供从事固体物理学工作的有关人员参考。

前　言

凝聚态物理学是本世纪发展起来的前沿科学，是材料科学的基础，而固体理论又是凝聚态物理学的基础。在当今以电子技术、新材料、新器件为主干的高新科技迅速发展的年代里，各种新现象、新理论取得了惊人的新发现和新发展，凝聚态物理以及相关专业的研究生和科技人员大量增加，迫切需要一本既能适当反映当今科技前沿动态，又能深入浅出和系统地介绍固体理论基础知识，使读者便于学习和掌握固体理论中有关基本概念、基本理论以及处理问题的基本方法的书。为此，我们根据近几年来在西南师范大学和四川师范大学等高校开设固体理论课程的教学实践和有关科学研究的基础上，撰写了《固体理论及其应用》一书。

本书力图做到系统性强，深入浅出，内容次序符合认识规律；注重理论与实际紧密结合，反映凝聚态物理前沿课题中的新发现和提出的新理论和新方法；物理图像清晰，物理思想明确，详略得当，便于教与学。

本书共分八章，第一章介绍了场的量子化的有关基础知识，作为学习本书的基础；从第二章起，按照电子、离子、电子—离子相互作用的顺序，依次介绍了固体电子能带理论、晶体中电子—电子相互作用、固体磁性理论、晶格振动、电子—声子相互作用等固体理论中的基本内容；第七章初步介绍了固体理论中的格林函数理论，作为今后进一步研究多粒子体系问题的基础；第八章介绍了纳米微粒与分形理论的有关知识。其中，第一、二、三、四、五、六章是最基本的内容，讲授这几章可控制在 70 学时左右，其余章节可另行安排时间讲授或由读者自学。

本书第一章由苏州大学张文彬撰写；第二、五章由西南师范大

学郑瑞伦撰写；第三、六、七章由重庆师范学院胡先权撰写；第四章由西南民族学院杨国祥撰写；第八章由四川师范大学方可撰写。全书经郑瑞伦、胡先权、杨国祥统一修改，这就保证了各章内容的协调和风格的一致性。

作者衷心感谢西南师范大学出版基金委员会的大力支持，感谢校、系和出版社领导的热情鼓励和大力支持帮助。作者衷心感谢中国科学院物理研究所李伯臧研究员、四川联合大学郑文琛教授和西南师范大学邓昭镜教授的热情指导。在修改整理过程中，还得到许多学校的老师的热情帮助，谨此致谢！限于水平，错误与不妥之处请读者指正。

编　　者

1996 年 5 月

目　　录

第一章　场的量子化

本章首先介绍场和粒子的一些基本特征与场的量子化的一般方法和意义，以了解固体理论中要处理的粒子及相互作用的性质。然后介绍薛定谔波场的量子化，即量子化场表述(Formulation)。最后分别讨论经典的振动声场和电磁场的量子化。用量子化场理论方法处理固体中相互作用多粒子体系的结果，得到所谓准粒子体系，叫固体量子场。

§1.1　粒子和场

已经证实，物质的“基本粒子”已有数十种，如质子、反质子、电子、正电子、反中微子、光子等。此外，还有数百种所谓准粒子，即共振态。基本粒子之间存在着四种不同的相互作用：强相互作用，电磁相互作用，弱相互作用，引力相互作用。最近发现，后两种相互作用可以统一成一种性质的相互作用。基本粒子一般是不稳定的，可在一定条件下自发的产生和消灭以及相互转变，即使是前面提到的那几种一般是稳定的粒子也是如此。有的不稳定粒子的平均寿命短至约 10^{-18}秒。研究表明，所谓“基本粒子”仍有其内部结构。

研究基本粒子的性质、内部结构、相互作用、相互转变和相应的守恒定律，是相当复杂和困难的，许多问题至今没有解决。本节只介绍粒子的一些共同性质，以及场的量子化。

一、粒子及其主要性质

1. 质量和动量　低速运动的非相对论粒子的基本特征是具有静止质量 m 和动量 p，高速运动的相对论粒子的质量、动量和能量

E 由下式联系起来

$$E^2 = m_0^2c^4 + c^2p^2$$

例如，电子静止质量 $m_{e0}=9.109534\times10^{-28}g$ 等。

2. 自旋　按照量子论，粒子具有本征自旋角动量，其值等于普朗克常数 ħ 的半整数倍。例如，对电子、质子和光子分别为 $S_e=\frac{1}{2}$，$S_p=\frac{1}{2}$ 和 $S_\gamma=1$。

3. 电荷　这是一个基本性质。若粒子带电，其电荷值总是基本电荷 e 的整数倍。虽然已发现组成前述基本粒子的所谓夸克子具有电荷 $\pm\frac{1}{3}e$，$\pm\frac{2}{3}e$，但尚不曾观察到自由夸克子。固体中，一些电子和晶格原子可能组成所谓“复合粒子”，比如“孤子”具有分数电荷，不过是一种特殊状态。

4. 寿命 τ

只有电子、质子、中微子和它们的反粒子以及光子在自由态是稳定的，即有无限长的寿命。其它粒子是不稳定的，存在着自发衰变，即一粒子自动地变成一些其它粒子，并按指数规律 $\exp(-t/\tau)$ 进行。例如，中子的 β 衰变，$n\rightarrow p+e^-+\bar{v}_e$，即中子变成质子、电子和反中微子，寿命 $\tau_n=918$ 秒。又如，π^+ 介子衰变成 μ^+ 介子和中微子 V_μ，$\pi^+\rightarrow\mu^++V_\mu$，寿命 $\tau_{\pi^+}=2.6030\times10^{-8}$ 秒。

二、量子化场

为表示粒子间的相互作用以有限速度传播而不是所谓瞬时超距作用，在粒子存在的周围空间引入与粒子相联系的场。例如，运动带电粒子在周围空间产生电磁场，它由 Maxwell 方程组描写，这是一种经典的波动场，其场量为电场强度和磁场强度(或磁感应强度)，或相应的电磁势。若将该场量子化，得到量子化的电磁场，其中充满由独立电磁谐振子产生的能量子，叫做光子。光子以光速运动，它可以脱离运动电荷而存在，具有能量、动量和质量，但无静

止质量。放射性衰变和核反应过程中发出的 γ 射线，是频率极高、粒子性极强的光子流，而一般无线电电磁场则是主要显示波动性的量子电磁场，一般处理为经典波场。

由机械振动形成的波场，其场量是振动位移，场方程是波动方程，如果将这种经典波场量子化就得到由独立谐振子产生的能量子，称为声子；对于晶体中由晶格振动产生的格波，量子化后可以得声学声子和光学声子，它们具有能量和准动量，是一种准粒子。

反映低速微观粒子运动的是薛定谔波场，其场量是波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\psi^*(\boldsymbol{r},t)$，场方程是薛定谔方程，这是一种几率性的场。相应的粒子动力学是薛定谔波动力学，即平时讲的量子力学。若将此波动视为“经典场”，将其量子化，可得 Bose 或 Fermi 量子场，其场量子是 Bose 子或 Fermi 子。这种量子化程序常称为“二次量子化”。因为薛定谔场已将粒子性描述量子化运用到波动性描述，而第二次又将波动性转到粒子性描述，这种描述更好地反映了微观粒子波－粒二象性。以后将看到，对这种几率场的量子化，实质上是将量子力学的薛定谔表述变到量子化场表述，两者实质上都是对粒子运动的一次量子化描述。为了描述方便，后面将尽可能用“量子化场表述”，而不用“二次量子化”。

量子力学还有所谓矩阵表述，其动力变量是矩阵，且勿需要求乘法对易关系。优点是，一般勿需具体的微积分计算。具体处理问题时，用哪种表述更方便，要看问题的性质而定。一般说来处理多体问题用量子化场表述较简单，而为了算出数据结果用矩阵表述又更易做到。本书将着重介绍量子化场表述方法，并在处理固体理论中的具体问题时加以应用。有时混合使用不同的方法。

在高速运动粒子问题中，要将描述低速运动微观粒子的薛定谔方程推广到相对论性的波动方程，即 Dirac 方程或 Klein－Gordon 方程，并将其代表的波场量子化，才能处理粒子的产生、消灭与相互作用和转换问题。并认为可用不同的“量子场”来描述不同

性质的基本粒子，量子场的各种受激态代表处在各状态下的基本粒子系统，激发代表粒子的产生，退激发代表粒子的消失，且“量子场”是物质存在的形式之一。例如，按这一想法来处理光子的产生和消失问题而引进了“电子场”，并将其量子化，而得到所谓“量子电子场”，它的激发和退激发代表电子的产生和消灭。处在不同受激态的电子场代表处在不同状态下的电子体系。

无论什么性质的场，都代表一个自由度数很大（或无限）的物理体系。未曾量子化的经典波场或薛定谔几率波场，都是相应的场量在空间和时间不同点上的连续变化和分布，且作为一个整体代表一个物理体系，可视为描述一个分立体系的极限情况。量子化后的量子场中，充满相应的粒子或准粒子，它们具有能量、动量（或准动量），场的一个谐振子代表一个自由度，自由度数 N 一般很大，有时趋于无限大。微观粒子的波场和量子场都反映了波粒二象性。

场量子化的具体方法可以不同，一般地说，是引入产生和消灭算符（或相应的场算符），它们满足一定的对易关系，并引入粒子数表象，将动力体系波动方程演化成以产生和消灭算符表象的相应方程，然后再求解，以得到相应体系的能量、动量（或准动量）、态函数等等，再计算有关力学量。用量子场论方法解决相互作用多粒子体系问题时一个突出的优点是，可以将微分积分计算化成相应的代数计算，使计算过程简化。当然，对具体的相互作用多粒子体系的计算，一般仍是近似的。

三、固体量子场

固体由原子、离子或其集团组成，而原子、离子又由原子核和电子组成壳层结构。固体的多数性质决定于外层电子和粒子的电磁相互作用及运动状态。与光速相比，粒子的运动是低速的，故可以用经典力学和电磁学理论描述，或用薛定谔量子力学描述。也可用量子化场方法，将经典场量子化，或将薛定谔表述转到量子化场

表述，用以研究固体多粒子体系的相互作用、转化和运动问题，得到固体量子场。

用固体量子化场理论来处理固体中相互作用多粒子体系，可得到一系列准粒子，它们具有能量和准动量。用准粒子概念，可以使固体中粒子相互作用、转换及运动的情况变得较容易理解而形象化，并使具体计算变为可能进行或较简单。例如，晶格热振动形成的格波场经量子化可以得到声子(Phonons)，而声子与电子的碰撞导致电阻的产生。在晶体周期势场中运动的电子，可以化成具有有效质量 m_e^+ 的近似自由电子，而在近满带中运动的电子又可以化成具有有效质量 m_h^* 和正电荷的近自由空穴，晶体中电子与空穴间的库仑相互作用，可得到束缚的电子－空穴对，这就是激子(Excitons)。晶体中自由电子的密度起伏，可以得到等离子体振荡波，将其量子化便得到等离子体量子—等离激元(Plasmanons)。铁磁体在低温下原子自旋磁矩取向的传播形成自旋波，将其量子化得自旋波量子(Magnons)。离子晶体中缓慢运动的电子可以引起附近离子位移，造成局部晶格畸变。电子拖曳这种局部畸变在晶体中运动，电子和局部畸变作为一个整体在晶体中形成极化子(Poralons)。上述准粒子是固体理论中常遇到的，我们将在有关章节作详细介绍。

§1.2 薛定谔波场的量子化

固体理论中遇到的微观粒子，一般用量子力学处理。本节将介绍如何从单粒子薛定谔量子力学自然转到描述多粒子体系的量子场表述量子力学。

一、薛定谔表述量子力学的一些基本内容

薛定谔场量是单粒子态函数 $\psi^*(x,t)$ 和 $\psi(r,t)$，r 是连续变

量，其一切可能值代表场的无限个自由度，相应的动力学方程是

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=H\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{1.2.1}$$

这里

$$H=H^{+}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}), \tag{1.2.2}$$

令 $\psi_\mu(\boldsymbol{r})$、$\psi_\mu^*(\boldsymbol{r})$是能量本征值 E_μ 的定态，它满足正交归一条件

$$<\psi_{\mu'}|\psi_\mu>=\int\psi_{\mu'}^*\psi_\mu d\tau=\delta_{\mu\mu'} \tag{1.2.3}$$

(1.2.1)的一般解可写为定态解的线性叠加

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r},t)&=\sum_\mu C_\mu(t)\psi_\mu(\boldsymbol{r}),\\ \psi^*(\boldsymbol{r},t)&=\sum C_\mu^*(t)\psi_\mu^*(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{1.2.4}$$

而 $C_\mu(t)$、$C_\mu^*(t)$为

$$\left.\begin{aligned}C_\mu(t)&=C_\mu\exp(-i\frac{E_\mu}{\hbar}t)=\int\psi(\boldsymbol{r},t)\psi_\mu^*(\boldsymbol{r})d\tau,\\ C_\mu^*(t)&=C_\mu^*\exp(i\frac{E_\mu}{\hbar}t)=\int\psi^*(x,t)\psi_\mu(\boldsymbol{r})d\tau\end{aligned}\right\} \tag{1.2.5}$$

$|C_\mu(t)|^2=|C_\mu|^2$ 表征粒子处于第 μ 个本征态 ψ_μ 的几率。在固体理论中，处理的问题，多数属定态问题，故(1.2.4)和(1.2.5)变为

$$\left.\begin{aligned}&\psi(\boldsymbol{r})=\sum_\mu C_\mu\psi_\mu(\boldsymbol{r}), &&\psi^*(\boldsymbol{r})=\sum_\mu C_\mu^*\psi_\mu^*(\boldsymbol{r})\\ &C_\mu(t)=\int\psi(\boldsymbol{r})\psi_\mu^*(\boldsymbol{r})d\tau &&C_\mu^*=\int\psi^*(\boldsymbol{r})\psi_\mu(\boldsymbol{r})d\tau\end{aligned}\right\} \tag{1.2.6}$$

经典的坐标 $\boldsymbol{r}$ 和动量 $\boldsymbol{p}$ 过渡到量子力学时，$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 以及其它力学量均应过渡到算符，而它们的量值必须以平均值来代替。例如

$$\begin{aligned}<x>&=<\psi(x,t)|x|\psi(\boldsymbol{r},t)>\\ <p_x>&=<\psi(\boldsymbol{r},t)|p_x|\psi(\boldsymbol{r},t)>\end{aligned} \tag{1.2.7}$$

平均值随时间的变化应以量子 Poisson 括号来表征。例如

$$\frac{d}{dt}<x>=\frac{i}{\hbar}<\hat{H}\hat{x}-\hat{x}\hat{H})> \tag{1.2.8}$$

而算符 x 和 P_x 满足对易关系

$$P_x x - x p_x = \frac{\hbar}{i} \tag{1.2.9}$$

$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的 y,z 的分量也有类似的关系。哈密顿的平均值为

$$<H> = <\psi(\boldsymbol{r},t)|\hat{H}|\psi(\boldsymbol{r},t)> = \sum_{\mu,\mu'} E_\mu C_{\mu'}^*(t) C_\mu(t) <\psi_{\mu'}|\psi_\mu>$$

$$= \sum_\mu E_\mu C_\mu^*(t) C_\mu(t) = \sum_\mu E_\mu C_\mu^+ C_\mu \tag{1.2.10}$$

二、薛定谔波场的量子化

为将薛定谔表述转化到量子化场表述，即进行所谓二次量子化，应将 $C_\mu^*(t) \equiv C_\mu^+(t)$ 和 $C_\mu(t)$ 以及 $C_\mu^* \equiv C_\mu^+$ 和 C_μ 看成算符，C_μ^+ 是 C_μ 的转置复共轭，它们满足一定的对易关系。为了求出该对易关系，仿照(1.2.8)，写出 $C_\mu(t)$ 的运动方程，以平均值 $<H>$ 代替算符 H，并认为 $<H>$ 和 $C_\mu(t)$ 是量子化场表述中的算符，于是有

$$\frac{\partial C_{\mu'}(t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(<H> C_{\mu'}(t) - C_{\mu'}(t) <H>) \tag{1.2.11}$$

将(1.2.5)和(1.2.10)代入上式，得到量子化场表述的基本方程为

$$-E_{\mu'} C_{\mu'} = \sum^{\mu} E_\mu (C_\mu^+ C_\mu C_{\mu'} - C_{\mu'} C_\mu^+ C_\mu) \tag{1.2.12}$$

上式有两组解，其一为

$$\left.\begin{aligned} C_{\mu'} C_\mu - C_\mu C_{\mu'} &= 0 \\ C_{\mu'}^+ C_\mu^+ - C_\mu^+ C_{\mu'}^+ &= 0 \\ C_{\mu'} C_\mu^+ - C_\mu^+ C_{\mu'} &= \delta_{\mu\mu'} \end{aligned}\right\} \tag{1.2.13}$$

此即产生和消灭算符的对易关系。(1.2.13)实际上相应于下列场算符的对易关系

$$\left.\begin{aligned} \psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}) - \psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}') &= 0 \\ \psi^+(\boldsymbol{r}')\psi^+(\boldsymbol{r}) - \psi^+(\boldsymbol{r})\psi^+(\boldsymbol{r}') &= 0 \\ \psi(\boldsymbol{r}')\psi^+(\boldsymbol{r}) - \psi^+(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}') &= \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \end{aligned}\right\} \tag{1.2.14}$$

满足(1.2.12)的另一组解是

$$
\left.\begin{aligned}
C_\mu C_{\mu'} + C_{\mu'} C_\mu &= 0 \\
C_\mu^+ C_{\mu'}^+ + C_{\mu'}^+ C_\mu^+ &= 0 \\
C_{\mu'} C_\mu^+ + C_\mu^+ C_{\mu'} &= \delta_{\mu\mu'}
\end{aligned}\right\} \tag{1.2.15}
$$

与上式相应的场算符对易关系是

$$
\left.\begin{aligned}
\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}') + \psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}) &= 0 \\
\psi^+(\boldsymbol{r})\psi^+(\boldsymbol{r}') + \psi^+(\boldsymbol{r}')\psi^+(\boldsymbol{r}) &= 0 \\
\psi(\boldsymbol{r}')\psi^+(\boldsymbol{r}) + \psi^+(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}') &= \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')
\end{aligned}\right\} \tag{1.2.16}
$$

以后将看到，满足(1.2.13)或(1.2.14)的量子化场相当于 Bose 统计场，而满足(1.2.15)或(1.2.16)的场是 Fermi 统计场。

下面引入粒子数表象，或称为占据数表象的概念。

在薛定谔表述中，$\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})=|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ 是在 $\boldsymbol{r}$ 处发现粒子的几率密度。在量子化场表述中，$\psi^*(\boldsymbol{r})=\psi^+(\boldsymbol{r})$和 $\psi(\boldsymbol{r})$被视为算符。因此，自然可以对 N 粒子体系，定义场的粒子数算符为

$$
\hat{N}=\int\psi^+(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d\tau=\sum_{\mu,\mu'}C_\mu^+C_{\mu'}\delta_{\mu\mu'}=\sum_\mu C_\mu^+C_\mu \tag{1.2.17}
$$

计算中利用了(1.2.6)和(1.2.3)，显然，$C_\mu^+C_\mu$是在单粒子态$|\mu>$的场的粒子数算符，且是 Hermite 算符，记为 $\hat{n}_\mu\equiv C_\mu^+C_\mu$，而 $\hat{\rho}=\psi^+(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$称为粒子密度算符。

按照对易规则(1.2.13)和(1.2.15)，比较(1.2.17)和(1.2.10)，并将$\langle H\rangle$看作量子化场的哈密顿 $\hat{H}$，有

$$
[\hat{N},\hat{H}]=0 \tag{1.2.18}
$$

这表明，$\hat{N}$和 $\hat{H}$可以同时对角化，且有共同的本征函数完全集合，可以构成 Hilbert 空间的基矢集合，用$\{|\Psi_{NE}>\}$表示。有

$$
\hat{N}\,|\psi_{NE}>=N|\psi_{NE}>,\hat{H}\,|\psi_{NE}>=E|\psi_{NE}>,<\psi_{NE}|\psi_{NE}>=1
$$

用 $\Phi_0=|\psi_{00}>$表示场的真空态，即没有粒子的态，具有如下性质：

$$
\hat{N}\,|0>=\hat{H}\,|0>=0,<0|0>=1, \tag{1.2.20}
$$