

研究生教学用书

教育部研究生工作办公室推荐

凝聚态物理学

(上卷)

Condensed Matter Physics

(Volume I)

冯端 金国钧

高等教育出版社

研究生教学用书 教育部研究生工作办公室推荐

ISBN 7-04-012738-5



9 787040 127386 >

定价 56.00 元

研究生教学用书

教育部研究生工作办公室推荐

凝聚态物理学

(上卷)

Condensed Matter Physics

(Volume I)

冯 端 金国钧

高等教育出版社

图书在版编目(CIP)数据

凝聚态物理学(上卷)/冯端,金国钧. —北京:高等教育出版社,2003.9

ISBN 7-04-012738-5

I. 凝... II. ①冯... ②金... III. 凝聚态-物理学
IV. O469

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第026008号

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街4号
邮政编码 100011
总 机 010-82028899

购书热线 010-64054588
免费咨询 800-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>

经 销 新华书店北京发行所
印 刷 中国农业出版社印刷厂

开 本 787×960 1/16
印 张 41.5
字 数 760 000

版 次 2003年9月第1版
印 次 2003年9月第1次印刷
定 价 56.00元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

内 容 提 要

本书在把握从固体物理学到凝聚态物理学历史发展脉络的基础上,为凝聚态物理学建立了一个逻辑上合理明晰的概念体系,并对学科涵盖的丰富内容进行了全面系统的论述.全书除一章综览外,包括八编,将分两卷出版.

上卷以综览开头,接下来是前四编.第一编凝聚物质的结构,论述晶态物质的结构对称性和构筑原理,并延伸至晶体之外,涉及到合金、玻璃、液晶和聚合物等,以及非均质物质;第二编各种物质结构中波的行为,从论述周期结构中波的传播出发,分别加上准周期性、表面和杂质,以及无序带来的影响,特别强调了不同结构和条件下电子的动力学和输运性质;第三编键、能带及其它,围绕电子结构这一重要主题,分别论述了在不同场合下键和能带途径的有效性,以及在处理强关联电子系统时的局限性,也指出了可能的改进方案,进而对纳米结构的电子性质进行了论述;第四编相变和有序相,首先利用唯象的 Landau 理论,突出对称性破缺这一核心概念,为各种不同的相变类型建立了统一的理论框架,进而分别论述了结构相变、磁有序相变和超导超流相变,兼顾到宏观和微观的描述,最后考察了与更广义的遍历性破缺有关的相变.

本书既是教育部研究生工作办公室推荐的研究生教学用书,适合于凝聚态物理学和材料科学等专业的研究生作为教材,也是普通高等教育“九五”国家级重点教材,适合于作为高校物理类专业高年级大学生选修“凝聚态物理学”课程的教材;当然,亦可供从事相关领域研究的科学工作者参考.

序 言

凝聚态物理学已经成为当代物理学中最重要和最丰产的分支学科. 它的特征在于研究人员众多, 研究结果丰富多彩, 对技术发展影响广泛, 与其它学科相互渗透迅速. 从历史来看, 凝聚态物理学是由固体物理学逐渐演变而来的. 但是, 由于人们对两者的学科分野缺乏明晰的认识, 再加上不熟悉凝聚态物理学所引入的用以统一理论框架的新概念体系, 因而, 虽然已有不少优秀的固体物理学教科书, 对于凝聚态物理学的教材也有一些卓有特色的尝试, 但覆盖全面且条理清晰、便于理解的凝聚态物理学入门教科书尚付阙如. 这一令人遗憾的情况特别清楚地表现在传统的固体物理学教科书与当代凝聚态物理学研究前沿之间出现的巨大鸿沟. 很多学生, 学过固体物理学甚至固体理论, 在接触到这一领域中的前沿问题 (例如翻阅近期的 *Physical Review Letters*) 时, 却总感到困惑不解. 理解上困难的关键并不在于对公式的推导或实验的过程不明, 而在于思想准备不足, 不知为何挑选这些课题, 以及基本概念从何而来. 针对这一情况, 国际上有一些知名学者提出了建议: 应该有一本著作来填补传统固体物理学领域与当代凝聚态物理学研究前沿之间的鸿沟. 这一著作应该处于两个极端之间: 一方面是传统的专著或教科书, 其内容包括一些久已确立的题材, 诸如周期结构、能带论、晶格动力学等, 如不理解其意义、不掌握其语言将无从进行科学交流; 另一方面是当今的课题, 如高温超导电性、定域化、量子 Hall 效应、巨磁与庞磁电阻、量子点、Fuller 烯与纳米碳管、光子晶体等, 如不涉及这类课题则无从开展其科研工作. 我们这本书的目标即在于填补两者之间的空白, 将固体物理学开拓、延伸和深化为凝聚态物理学, 且仍然保持入门著作的特色: 既保持学科的整体性, 也容纳许多新近的进展, 并使得这些新进展不像是从天上掉下来似的, 而是学科本身概念体系延伸发展的必然后果. 虽则当代凝聚态物理学内容丰富, 显得纷纭复杂, 光怪陆离, 但由于物质结构在概念上的统一性, 凝聚态物理学还是可以被组织成自洽的逻辑结构, 因而撰写一本系统论述其理论框架和主要内容的教科书的时机业已成熟.

P.W.Anderson 在其专著《凝聚态物理学的基本概念》(*Basic Notions of Condensed Matter Physics*, 1984) 中对凝聚态物理学的许多基本概念做了精辟的分析. 我们从这本富有创见的书中得到许多启示. 但这本书是为行家里手而写的, 对于初学的研究生显得高不可攀. 我们的工作在于澄清固体物理学与凝聚态物理学在概念体系上的共同之点和差异之处, 并对它们作清晰的表述, 使得这些基本概念具体化, 再用实例阐述, 放到合适的上下文之间. 我们面对了极其艰巨的工作: 根据物质结构统一性的概念线索来建立循序渐进的理论框架, 再将从篇幅浩瀚的资料中提炼出来的内容充实其中, 组织成为具有系统性和可读性的文本. 如果读者已

经学过固体物理学,当然驾轻就熟,即使未学过的,读来也无大碍;这里我们假定读者已初通量子力学和统计物理.由于凝聚态物理学与技术进展关系密切,也与交叉学科渗透频繁,我们希望这本书除了供从事凝聚态物理学研究的工作者参考外,也对从事化学、材料科学、电子科学与技术等方面研究的人士有所助益.

本书将凝聚态物理学丰富的内容组织成为八编,各编分别论述凝聚态物理学的某一侧面,融贯汇总起来才能够凸现整体的面貌.第一编到第三编乃是全方位地将传统的固体物理学进行开拓延伸,从而使其面目焕然一新,构成了凝聚态物理学的重要组成部分.在第一编中,从晶体出发,走向晶体之外;从硬物质出发,延伸到软物质.在第二编中,一方面用新内容充实波在周期结构中传播这一传统固体物理学的主题,然后再延伸到周期结构之外,论述定域态及定域化等新问题.第三编则紧扣物质电子结构这一主题,在横向将键与能带对照起来探讨,而在纵深方向则关注电子关联性的增强,从单电子近似逐步逼近关联电子态这一凝聚态物理学尚未彻底解决的核心问题.第四编到第七编的主题为对称破缺与有序化.在第四编中根据 Landau 相变理论框架来理解不同类型的相变,涉及晶体、准晶、液晶、颗粒、铁电体、磁有序相及超流体与超导体,再用遍历破缺来补充对称破缺,涵盖了另外一些相变.在第七编中则越出平均场理论的框架来处理临界现象和相关问题.第五编和第六编则分别论述激发态问题,显示了对称破缺相中存在恢复失去的对称性的倾向,从而影响到一些物理性质,论述分为元激发和拓扑缺陷两个层次来进行.第八编讨论了非平衡态的众多现象,与物理动力学和非线性科学交叉,终而引导读者面向复杂性这一具有挑战性的科学领域.

全书分为上下两卷出版,上卷包括前四编,下卷包括后四编.一般而言,我们假定读者已初通量子力学和统计物理的基础部分,但上述各编对基础的要求不尽相同.例如阅读第一、七与八等编或第四编的前半部,即使未学过量子力学亦无大碍.尽管各编之间彼此呼应又相互联系,但各编仍然可以单独阅读.

对如何使用本书作为研究生教材,这里我们先对上卷作以下说明.从我们在南京大学多年的教学实践来看,上卷可用作一学期,每周 4 学时,共 72 学时的教学.由于本书涉及的内容丰富,对上卷要进行全部课堂讲授,72 学时是不够的.考虑到研究生应具有一定的自学能力,故相当一部分内容,特别是直接与固体物理学相衔接的那些章节可略讲或不讲.另外,各编有相对的独立性,故如总课时有较大限制时,也可选择第一、二、三编或第一、三、四编实施教学.

从 1983 年起,作者之一(冯端)即开始关注凝聚态物理学的概念体系方面的问题,并写出一些文章(刊登在《物理》等杂志上)加以阐述;又于 1989 年在南京召开的全国凝聚态理论与统计物理学术会议的一次学术报告上,根据提出的概念体系对凝聚态物理学的新近进展进行了总结概括.随后,另一作者(金国钧)参与整理、充实、增补与撰写等工作,大部分文稿曾以《凝聚态物理学的新进展》为题

在《物理学进展》杂志上刊登(1990—1991),加以修订之后以专著形式出版,即《凝聚态物理学新论》(上海科技出版社,1992).自1990年以来,本书作者即在南京大学物理系为研究生开设“凝聚态物理学导论”课程,后来这一课程由作者之一(金国钧)单独承担.作者还先后在两次全国性的凝聚态物理学暑期讲习班(1996年由清华大学和北京大学联合在北京举办,1998年由南京大学在南京举办)上讲授了和本书有关的内容.本书的文稿是在历年的讲课笔记和讲义基础之上,经过大量的补充和改写而成的.

在漫长的教学和撰写过程中,作者要特别感谢南京大学物理系、研究生院和固体微结构物理国家重点实验室以及教务处和学生处所给予的支持.作者也要感谢龚昌德、李正中、翟宏如、江元生、邢定钰、董锦明、胡安、章维益、李建新、叶维江等教授对本书文稿的部分篇章进行了审阅,并提出了宝贵的修改意见.当然本书中存在的任何错误或者不妥之处,完全由本书的作者负责.另外,作者还要感谢赵忠贤、甘子钊、于淦、苏肇冰、李华钟、邹广田、欧阳钟灿、李振亚、田德诚、王仁卉、闻海虎、吕力、汪子丹、金晓峰、侯建国、朱劲松、王牧、王炜、马余强、施毅等教授.他们有的曾经对本书的撰写作过有益的讨论,有的则提供过有用的参考资料.作者也要感谢南京大学物理系历届研究生和几位本科生在整理文稿中给予的协助.赵玉达、杨晨为本书插图的绘制和文稿的编排付出了劳动.金达飞在此二人之后做了设计、修改与完善工作.程胜峰通读全书,为统一使用SI制提供了帮助.

作者之一(金国钧)还要感谢胡皎瑜先生在本书草创时期提供了个人计算机;感谢汪子丹教授两次邀请访问香港大学,除开展合作研究外,也提供了收集资料及部分写作的机会;感谢鞠国兴教授在中文 \LaTeX 使用上的帮助;感谢彭茹雯博士近年来参与教学辅导工作.

本书在撰写过程中得到南京大学创建高水平大学教改项目和国家自然科学基金委员会的资助.

最后,我们将此书奉献给南京大学的百年校庆(1902—2002).

冯 端 金国钧

2002年7月5日

郑重声明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》，其行为人将承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。为了维护市场秩序，保护读者的合法权益，避免读者误用盗版书造成不良后果，我社将配合行政执法部门和司法机关对违法犯罪的单位和个人给予严厉打击。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

反盗版举报电话：(010) 58581897/58581698/58581879/58581877

传 真：(010) 82086060

E - mail: dd@hep.com.cn 或 chenrong@hep.com.cn

通信地址：北京市西城区德外大街4号

高等教育出版社法律事务部

邮 编：100011

购书请拨打电话：(010)64014089 64054601 64054588

策 划 杨 祥 陈小平 张思孳 胡凯飞

编 辑 杨 祥 陈小平 张思孳 胡凯飞

封面设计 李卫青

责任绘图 朱 静

版式设计 胡志萍

责任校对 胡晓琪

责任印制 杨 明

目 录

综 览	1
§0.1 物质世界的层次化	1
§0.1.1 20 世纪的物理学	1
§0.1.2 简单性与复杂性	4
§0.1.3 层展现象	5
§0.2 凝聚态物理学的范围	8
§0.2.1 理论方法: 量子力学与经典物理	9
§0.2.2 凝聚现象	10
§0.2.3 有序化	11
§0.3 凝聚态物理学的历史透视与概念框架	13
§0.3.1 固体物理学的范式	14
§0.3.2 键与能带——从单电子近似走向关联电子态	16
§0.3.3 合作现象及其它	18
§0.3.4 凝聚态物理学的范式	19
参考文献	24

第一编 凝聚物质的结构

第一章 结构的对称性	29
§1.1 关于对称性的基本概念	29
§1.1.1 对称及对称操作	29
§1.1.2 对称元素的组合定理	32
§1.1.3 对称群	34
§1.1.4 对称群的表示	35
§1.2 有限结构与点群	37
§1.2.1 对称轴的组合同规则	37
§1.2.2 循环群与二面体群	37
§1.2.3 正多面体与立方点群	38
§1.3 周期结构和空间群	41
§1.3.1 周期结构和晶格	42
§1.3.2 Bravais 格	43

§1.3.3 空间群	45
§1.3.4 晶体结构的描述	47
§1.4 物质结构及其 Fourier 变换	47
§1.4.1 普遍情形	47
§1.4.2 倒格	49
§1.4.3 周期结构的 Fourier 变换	50
§1.5 广义对称性	51
§1.5.1 高维空间群	51
§1.5.2 色群	51
§1.5.3 倒空间的对称性	53
§1.5.4 对称性的其它推广	53
参考文献	54
第二章 晶态结构及其构筑原理	55
§2.1 堆积结构与相关问题	55
§2.1.1 二维空间的拼砌、堆积和覆盖	55
§2.1.2 三维空间的堆积和覆盖	57
§2.1.3 结构中的空隙和相关问题	58
§2.2 键连结构和相关问题	62
§2.2.1 键连结构	62
§2.2.2 氧化物的结构	63
§2.2.3 结构族	64
§2.3 曲面与曲率	66
§2.3.1 曲面的曲率	66
§2.3.2 Euler 公式与 Gauss-Bonnet 公式	67
§2.3.3 曲面概述	68
§2.3.4 Fuller 烯和相关的结构	70
§2.4 准周期结构	72
§2.4.1 无理数与准周期函数	73
§2.4.2 一维准周期结构	73
§2.4.3 二维周期结构的投影	75
§2.4.4 二维准周期结构	77
§2.4.5 三维准周期结构	80
§2.4.6 基本概念的讨论	80
参考文献	83

第三章 晶态之外	85
§3.1 合金与取代无序	85
§3.1.1 有序与无序的合金	85
§3.1.2 分布函数与关联函数	87
§3.2 液体与玻璃	88
§3.2.1 概述	88
§3.2.2 统计描述	90
§3.2.3 非晶态的结构模型	93
§3.3 液晶	96
§3.3.1 概述	96
§3.3.2 向列相和胆甾相	96
§3.3.3 近晶相和柱状相	99
§3.3.4 溶致液晶及其它	100
§3.4 聚合物	101
§3.4.1 结构和构型	101
§3.4.2 无规线团与溶胀线团	104
§3.4.3 单链的关联函数及其实验测定	106
§3.4.4 有序与部分有序结构	108
§3.5 生物聚合物	110
§3.5.1 核酸的结构	110
§3.5.2 蛋白质的结构	110
§3.5.3 信息与结构	113
参考文献	114
第四章 非均质结构	115
§4.1 复相结构	115
§4.1.1 结构层次与多层次结构	115
§4.1.2 非均质材料的微结构特征	118
§4.1.3 有效媒质近似: 二相合金微结构与物性关联问题处理实例	122
§4.2 结构的几何相变: 逾渗	123
§4.2.1 键逾渗与座逾渗	123
§4.2.2 逾渗理论概述	124
§4.2.3 逾渗的实例	126
§4.3 分形	127
§4.3.1 理想分形与分形维数	128

§4.3.2 实际的分形	129
§4.3.3 自仿射分形	131
§4.3.4 多重分形的基本概念	133
参考文献	135

第二编 各种物质结构中波的行为

第五章 周期和准周期结构中波的传播	139
§5.1 波传播概念的统一性	139
§5.1.1 波方程和周期势	139
§5.1.2 Bloch 波	140
§5.1.3 经典波研究的复兴	142
§5.2 晶体中的电子	143
§5.2.1 自由电子气模型	143
§5.2.2 近自由电子模型	144
§5.2.3 紧束缚电子模型	146
§5.2.4 超晶格的 Kronig-Penney 模型	148
§5.2.5 态密度和维度性	150
§5.3 格波与弹性波	151
§5.3.1 格波的色散关系	152
§5.3.2 格波的频谱	154
§5.3.3 周期复合介质中的弹性波 - 声子晶体	156
§5.4 周期结构中的电磁波	157
§5.4.1 层状周期介质中的光子带隙	157
§5.4.2 X 射线动力学衍射	159
§5.4.3 光子晶体的能隙	163
§5.4.4 非线性光学晶体的准相位匹配	166
§5.5 准周期结构中的波	169
§5.5.1 一维准晶的电子能谱和波函数	169
§5.5.2 人工 Fibonacci 结构中波的透射	171
§5.5.3 实际准晶的膺能隙	173
参考文献	175

第六章 Bloch 电子动力学	177
§6.1 能带电子的基本性质	177
§6.1.1 电子速度和有效质量	177
§6.1.2 金属和非金属	179
§6.1.3 空穴	181
§6.1.4 金属中电子的比热	182
§6.2 电场中电子的运动	183
§6.2.1 Bloch 振荡	183
§6.2.2 负微分电阻	185
§6.2.3 Wannier-Stark 梯	186
§6.3 磁场中电子的运动	189
§6.3.1 回旋共振	189
§6.3.2 Landau 量子化	191
§6.3.3 de Haas-van Alphen 效应	195
§6.3.4 传导电子磁化率	198
参考文献	201
第七章 表面和杂质效应	203
§7.1 表面电子态	203
§7.1.1 金属表面	203
§7.1.2 半导体表面态	207
§7.2 电子杂质态	209
§7.2.1 带电中心的屏蔽效应	210
§7.2.2 电子局域模	212
§7.2.3 电子自旋密度振荡	214
§7.3 与表面及杂质相关的振动	215
§7.3.1 表面振动	215
§7.3.2 杂质振动模	217
§7.4 光子晶体中的缺陷模	220
§7.4.1 层状周期性结构中的电磁表面模	220
§7.4.2 点缺陷	222
§7.4.3 线缺陷	224
参考文献	225

第八章 输运性质	227
§8.1 正常输运	227
§8.1.1 Boltzmann 方程	227
§8.1.2 直流和交流电导率	229
§8.1.3 金属电阻率的微观机制	231
§8.1.4 半导体中的电输运	234
§8.1.5 其它的输运系数	236
§8.2 磁场中的电荷输运与自旋输运	237
§8.2.1 经典 Hall 效应	238
§8.2.2 Shubnikov-de Haas 效应	239
§8.2.3 正常磁电阻及其各向异性	241
§8.2.4 自旋极化与自旋输运	247
§8.2.5 铁磁金属的电阻率与磁电阻	248
§8.3 隧穿现象	250
§8.3.1 势垒透射	250
§8.3.2 半导体超晶格的共振隧穿	253
§8.3.3 电击穿和磁击穿	255
§8.3.4 隧道磁电阻	258
§8.3.5 扫描隧道显微术	260
参考文献	263
第九章 无序系统中波的定域化	265
§9.1 定域化的物理图像	265
§9.1.1 波定域化的简单演示	265
§9.1.2 特征长度和特征时间	266
§9.1.3 粒子扩散和定域化	268
§9.2 弱定域化	269
§9.2.1 增强背散射	269
§9.2.2 依赖于尺寸的扩散系数	271
§9.2.3 电导的干涉修正	273
§9.3 强定域化	274
§9.3.1 连续渗流模型	275
§9.3.2 Anderson 模型	276
§9.3.3 迁移率边	279
§9.3.4 Edwards 模型	280

§9.3.5 跳跃电导	281
§9.3.6 光的强定域化	283
参考文献	285
第十章 介观量子输运	287
§10.1 介观系统的特点	287
§10.1.1 介观结构的界定	287
§10.1.2 不同的运输区	288
§10.1.3 量子通道	289
§10.2 Landauer-Büttiker 型电导	291
§10.2.1 Landauer 公式	291
§10.2.2 二端单通道电导	293
§10.2.3 两端多通道电导	295
§10.3 回路中的电导振荡	296
§10.3.1 电子波函数的规范变换	296
§10.3.2 金属环中的 Aharonov-Bohm 效应	297
§10.3.3 持续电流	300
§10.3.4 Altshuler-Aronov-Spivak 效应	303
§10.3.5 静电 Aharonov-Bohm 效应	303
§10.4 电导涨落	304
§10.4.1 电导的非局域性	305
§10.4.2 磁场反转的倒易性	306
§10.4.3 普适电导涨落	308
参考文献	311

第三编 键、能带及其它

第十一章 键途径	315
§11.1 原子与离子	315
§11.1.1 氢原子	315
§11.1.2 多电子原子中的单电子近似	317
§11.1.3 原子内的交换作用	318
§11.1.4 Hund 定则和离子磁矩	320
§11.2 双原子分子	323
§11.2.1 氢分子离子 H_2^+ 的精确解	323

§11.2.2	分子轨道法	325
§11.2.3	Heitler-London 法	329
§11.2.4	自旋 Hamilton 量和 Heisenberg 模型	331
§11.3	多原子分子	332
§11.3.1	多原子分子问题的分子轨道法	332
§11.3.2	价键轨道	333
§11.3.3	分子轨道方法的 Hückel 近似	335
§11.3.4	一些分子的电子结构	337
§11.4	各向异性环境中的离子	340
§11.4.1	三种晶体场	340
§11.4.2	过渡金属离子的晶场效应	340
§11.4.3	Jahn-Teller 效应	341
§11.4.4	配位场中的离子	342
	参考文献	345
第十二章	能带途径	347
§12.1	能带计算的各种方法	347
§12.1.1	正交平面波	347
§12.1.2	赝势	349
§12.1.3	糕模势与缀加平面波	351
§12.1.4	能带的对称性和 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法	352
§12.2	从多粒子 Hamilton 量到自洽场方法	354
§12.2.1	多粒子 Hamilton 量	354
§12.2.2	价电子近似和绝热近似	355
§12.2.3	Hartree 近似	356
§12.2.4	Hartree-Fock 近似	358
§12.3	电子结构取径于密度泛函	360
§12.3.1	从波函数到密度泛函	360
§12.3.2	Hohenberg-Kohn 定理	361
§12.3.3	自洽 Kohn-Sham 方程	362
§12.3.4	局域密度近似及其它	363
§12.3.5	Car-Parinello 方法	365
§12.4	若干材料中的电子结构	367
§12.4.1	金属	367
§12.4.2	半导体	372